

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий
Направление подготовки 03.03.02 «Физика»
Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Анализ спектра высокого разрешения молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ в диапазоне 2840-3300 cm^{-1}

УДК 535.338.4

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ61	Кузнецов А.В.		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШФВП	Уленекон. О.Н.	д.ф.-м.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН	Верховская М.В.	к.э.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ООД	Федорчук Ю.М.	д.т.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЭФ	Лидер А.М.	д.т.н.		

Томск – 2018 г.

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий
Направление подготовки 03.03.02 «Физика»
Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП
_____ Лидер А.М.
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерской диссертации

(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
ОБМ61	Кузнецову Алексею Валерьевичу

Тема работы:

Анализ спектра высокого разрешения молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ в диапазоне 2840-3300 cm^{-1}	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе <i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i>	Объект исследования: Изотополог молекулы этилена
--	--

<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<p>Обзор литературы. Интерпретация спектра молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$. Решение обратной спектроскопической задачи (получение спектроскопических постоянных). Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» Раздел «Социальная ответственность»</p>
<p>Перечень графического материала</p> <p><i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	
<p>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</p> <p><i>(с указанием разделов)</i></p>	
<p>Раздел</p>	<p>Консультант</p>
<p>Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</p>	<p>Верховская М.В.</p>
<p>Социальная ответственность</p>	<p>Федорчук Ю.М.</p>
<p>Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:</p>	
<p>1. Колебательно-вращательная спектроскопия молекул</p>	
<p>1.1. Особенности решения уравнения Шредингера для молекул</p>	
<p>1.2. Модель эффективных операторов</p>	

<p>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</p>	
--	--

Задание выдал руководитель:

<p>Должность</p>	<p>ФИО</p>	<p>Ученая степень, звание</p>	<p>Подпись</p>	<p>Дата</p>
<p>Профессор ИШФВП</p>	<p>Уленеков О.Н.</p>	<p>д.ф.-м.н., профессор</p>		

Задание принял к исполнению студент:

<p>Группа</p>	<p>ФИО</p>	<p>Подпись</p>	<p>Дата</p>
<p>ОБМ61</p>	<p>Кузнецов А.В.</p>		

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий
Направление подготовки Физика
Отделение школы Экспериментальная физика
Уровень образования Магистр
Период выполнения (осенний / весенний семестр 2017/2018 учебного года)

Форма представления работы:

Магистерская работа

(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)

**КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН
выполнения выпускной квалификационной работы**

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.08.2017	Обзор литературы	10
10.12.2017	Объект и методы исследования; Расчеты и аналитика	40
01.02.2018	Результаты проведенного исследования	30
01.05.2018	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	10
01.05.2018	Социальная ответственность	10

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШФВП	Уленев О.Н.	д.ф.-м.н., профессор		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЭФ	Лидер А.М.	к.т.н.		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа – 122 страницы, 15 рисунков, 27 таблиц, 47 источников, 2 приложения.

Ключевые слова: молекулярная спектроскопия, колебательно-вращательная спектроскопия, Фурье-спектр высокого разрешения, молекула этилена, спектроскопические постоянные.

Объектом исследования является изотополог молекулы этилена.

Цель работы – исследование колебательно-вращательного спектра высокого разрешения молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}$ в диапазоне 2840-3300 cm^{-1} .

В результате работы был проинтерпретирован спектр в районе полос ν_9 , ν_{11} и $\nu_2 + \nu_{12}$. Было определено порядка 3122 энергетических переходов для полосы ν_9 и 2558 для полосы ν_{11} и 447 для полосы $\nu_2 + \nu_{12}$. Определенно 841, 802 и 230 энергий для возбужденных состояний, соответственно. Решена обратная спектроскопическая задача. Полученный набор параметров воспроизводит начальные экспериментальные данные с точностью с $d_{\text{rms}} = 3.8 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$.

Область применения: полученные результаты будут использоваться для пополнения международных баз данных спектроскопических постоянных. Область применения: астрофизика, планетология и атмосферная оптика.

Оглавление

Введение.....	8
1. Колебательно-вращательная спектроскопия молекул	10
1.1. Особенности решения уравнения Шредингера для молекул	11
1.2. Модель эффективных операторов.....	13
1.3. Правила отбора.....	17
1.4. Резонансы типа Кориолиса	18
1.5. Эффект изотопозамещения	20
2. Объект и методы исследования.....	22
2.1. Общая характеристика исследуемой молекулы	22
2.2. Вычисление комбинационных разностей для анализа молекулярного спектра.....	25
3. Результаты и обсуждения.....	26
3.1. Условия и детали эксперимента	26
3.2. Изотопическое смещение $^{12}\text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow ^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ и параметры Кориолиса	28
3.3. Описание спектров и определение переходов	30
3.4. Анализ структуры взаимодействующих полос ν_9 , ν_{11} и $\nu_2+\nu_{12}$	35
5. Финансовый менеджмент	39
5.1. Проект и его сильные и слабые стороны.....	39
5.2. Диаграмма Исикавы.....	41
5.3. Организационная структура и план проекта.....	45
5.4. Бюджет научного исследования	47
5.5. Расчет научно-технического эффекта.....	52
6. Социальная ответственность	55
6.1. Организация рабочего места.....	55
6.2. Условия безопасной работы	57
6.3. Профилактические меры при природных и техногенных ЧС.....	69
6.4. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой производственной среды	72
6.5. Особенности законодательного регулирования проектных решений.....	77

Список литературы	79
Заключение	84
Приложение А	86
Приложение Б.....	113

Введение

На современном этапе развития науки о микромире вся точная количественная и качественная информация о молекулах, как физических объектах, извлекается спектроскопическими методами из анализа электромагнитных спектров молекул. Анализ колебательно-вращательных спектров высокого разрешения позволяет определить энергетические значения молекулы и найти спектроскопические постоянные, из которых впоследствии могут быть определены структурные характеристики и потенциальная функция молекулы. Имея информацию о спектроскопических свойствах молекул, можно решать многочисленные задачи в области физиологии, биохимии, экологии, планетологии, астрофизики и в других областей науки.

Этилен представляет интерес в многочисленных задачах. Молекула C_2H_4 представляет собой газообразное органическое соединение, которая имеет простейшую из алкеновых химических структур типа $C=C$, образованная двойной (ковалентной) связью. Этилен является важным мономерным сырьем в химической промышленности и используется для производства огромного количества продуктов (этиленоксида, этилендихлорида и этилбензола). Производство этилена является экономическим показателем в области органическо-химической промышленности.

Другое важное положение – содержание углеводородов в стратосфере всех планет гигантов. Среди ожидаемых продуктов, в значительном количестве присутствует C_2H_4 . Это соединение было обнаружено в северной авроральной области Юпитера, наблюдаемых в спектрах Voyager/IRiS [1]. Измерения отдельных спектральных линий излучения на Юпитере были представлены в работе [2]. Совсем недавно спектры излучения этилена были измерены в полюсах и на экваторе Юпитера (NASA) [3], что делает эту молекулу идеальным кандидатом для

изучения аврорального процесса в стратосфере. Зарегистрировано присутствие этилена на Сатурне [4], с использованием композитного инфракрасного спектрометра (CIRS). Сообщалось также о различных исследованиях этилена и других углеводородов на Нептуне, мини-Нептуне, Титане и других планет-гигантов [5-7]. Также молекула C_2H_4 содержится в атмосфере Земли и известна нам как загрязнитель, создаваемый лесными пожарами, выбросами вулканов, а также дорожным движением и растениями, которые влияют на концентрацию озона. Исходя из этого этилен очень интересен для различных планетарных и астрофизических приложений.

Цель работы: исследование колебательно-вращательного спектра высокого разрешения молекулы $^{13}C_2H_4$ в диапазоне $2840-3300\text{ см}^{-1}$.

Реализация указанной цели включила в себя решение следующих задач:

- 1) интерпретация колебательно-вращательного спектра в диапазоне $2840-3300\text{ см}^{-1}$;

- 2) решение обратной спектроскопической задачи и определение спектроскопических параметров полос, расположенных в исследуемом диапазоне.

1. Колебательно-вращательная спектроскопия молекул

Колебательно-вращательная спектроскопия является одним из наиболее важных инструментов для точного определения молекулярной структуры, суть которой заключается в исследовании переходов между уровнями вращательной энергии двух разных уровней колебательной энергии.

Колебательно-вращательные переходы S определяются суммой значений вращательного и колебательного вкладов (термов)

$$S = F_{v_i}(J) + G(v_i) =$$

$$= B_v J(J+1) - D_v J^2(J+1)^2 + \dots + \omega_e \left(v + \frac{1}{2}\right) + \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 + \dots \quad (1.1)$$

где v_i – колебательно-вращательный мод. Это уравнение следует из приближения Борна-Оппенгеймера, где мы можем рассматривать электронную и вращательно-колебательную задачу отдельно.

Всего существует три типа вращательно-колебательных переходов P , Q и R между нижним и верхним состояниями, которые схематически представлены на рисунке 1.

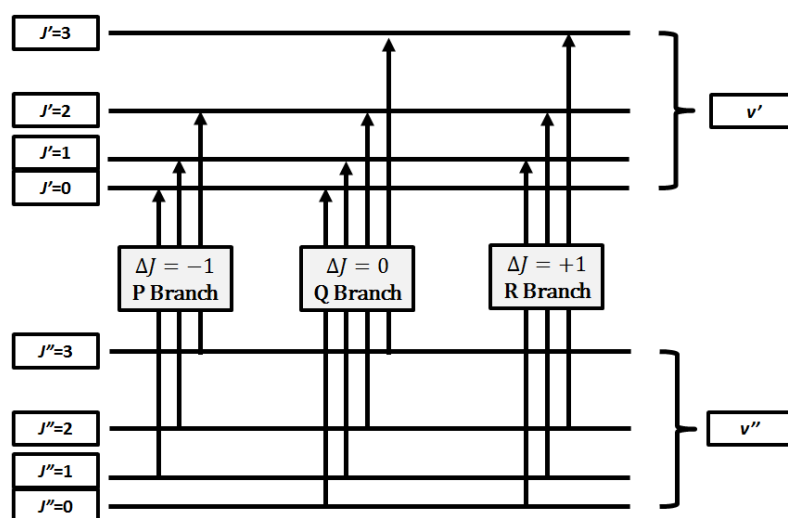


Рисунок 1 – P , Q , R – ветви колебательно-вращательных переходов

Различные волновые числа энергетических переходов P -, Q - и R -ветвей и их интенсивности образуют полосообразную структуру для данной колебательной моды в инфракрасном спектре.

Колебательные полосы для молекул типа асимметричного волчка имеют классификацию A -, B - и C -типа (рисунок 2). Каждый тип полосы имеет четкую форму, основанную на относительных интенсивностях линий P -, Q - и R -ветвей. Правила отбора, регулирующие переходы для каждого типа полосы, более подробно представлены в главе 1.4.

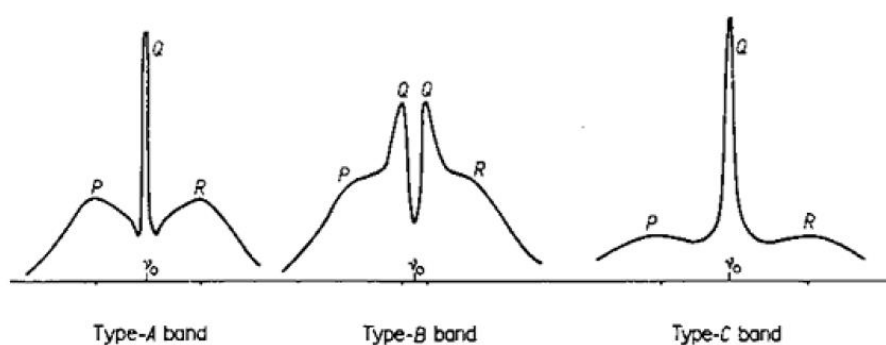


Рисунок 2 – Классификация типов полос [8]

Основной проблемой колебательно-вращательной спектроскопии является решение уравнения Шредингера. Знание решения этого уравнения дает возможность полностью исследовать молекулу как квантовый объект. Поэтому в этой главе будут рассмотрены более подробно особенности решения уравнения Шредингера.

1.1. Особенности решения уравнения Шредингера для молекул

Решением уравнения Шредингера являются собственные значения гамильтониана – возможные энергии, которыми может обладать квантовая система. Помимо собственных значений решением этого уравнения являются собственные функции, знание которых позволяет определять вероятности переходов.

В реальной жизни уравнение Шредингера решается только с гамильтонианом простых молекулярных систем, типа молекулярного иона

H_2^+ , с гамильтонианом для более сложных молекулярных систем и вовсе нет решения. Поэтому чтобы решить уравнение для более сложных молекул, используются различные варианты теории возмущений [9, 10].

Основная идея теории возмущения очень проста: мы делим гамильтониан на две части

$$H(a) = H_0(a) + h(a), \quad (1.2)$$

где $H_0(a)$ – оператор Гамильтониана («опорный» или «невозмущенный» гамильтониан), решение уравнения Шредингера с которым мы знаем; $h(a)$ – малая добавка к невозмущенному оператору («возмущение»), решение уравнения с которым мы не знаем.

Таким образом, мы можем построить гамильтониан для любых молекул и приблизительно предсказывать их свойства.

В данной работе интерес представляет колебательно-вращательный оператор гамильтониана. Следуя из теории возмущений, мы также можем его “разбить” на отдельные слагаемые различного порядка малости

$$H = H_0 + \sum_{n=1}^{\infty} H_n(\chi^n), \quad (1.3)$$

порядок малости определяется как χ^n , где χ – малый параметр $\chi \sim (m_e/M_n)^{1/4}$; m_e – масса электрона, M_n – средняя масса ядер молекулы.

Однако существует весомое отличие между операторами (1.2) и (1.3). Дело в том, что операторы h и H_0 являются функциями одних и тех же координат a . У операторов $H_n(\chi^n)$, рассматриваемых в теории молекул, помимо переменных, от которых зависит оператор начального приближения, как правило, являются функциями и от колебательных и вращательных координат. Соответственно при рассмотрении колебательно-вращательной задачи в качестве начального приближения удобно брать колебательный оператор (в этом случае возмущение будет зависеть не только от колебательных, но и от угловых переменных).

В классической теории возмущений решением являются суммы различных комбинаций матричных элементов $\langle \psi | h(a) | \psi' \rangle$, другими словами – числа. В то же время матричные элементы колебательно-вращательного оператора будут представлять собой уже не числа, а операторы. Причем в общем случае эти операторы не коммутируют. Поэтому использование теории возмущений для молекулярных задач является некорректным.

Отсюда следует необходимость в разработке альтернативных путей решения, одним из которых является метод эффективных операторов (глава 1.2).

1.2. Модель эффективных операторов

Суть метода эффективных операторов заключается в следующем: допустим мы не имеем возможности решить уравнения Шредингера с исходным гамильтонианом H , тогда пытаемся “построить” другой эрмитов оператор \tilde{H} , который бы имел два важных свойства:

- 1) решение уравнения с этим оператором \tilde{H} определяется в явном виде;
- 2) множество \tilde{B} всех решений уравнения Шредингера с оператором \tilde{H} тождественно совпадает с некоторым подмножеством B множества A решений уравнения с оператором H .

Оператор \tilde{H} удовлетворяющий этим двум условиям называют эффективным гамильтонианом. Один из способов его построения [11] основан на использовании операторов проектирования.

Допустим мы имеем оператор Гамильтона в следующем виде

$$H = H_0(a) + h(a, b), \quad (1.4)$$

где $H_0(a)$ – начальное приближение, $h(a, b)$ – возмущение, которое зависит от переменных a, b .

Пусть E_α и $|\alpha\rangle$ – собственные значения и собственные функции оператора начального приближения, при этом $|\alpha\rangle$ – полный ортонормированный набор функций, зависящий от переменных a .

Для определения собственных значений и собственных функций оператора (1.4) мы должны проделать следующую процедуру [9, 10, 12]: необходимо построить матрицу эрмитова оператора H на некоторых функциях $|\alpha i\rangle$, где $|i\rangle$ – произвольный набор функций, зависящий от переменных b и удовлетворяющий условию полноты и ортонормированности. И затем мы диагонализуем полученную матрицу путем унитарного преобразования

$$H \rightarrow H' = A^\dagger H A. \quad (1.5)$$

Известно, что элементы диагональной матрицы H' будут собственными значениями исходного оператора H , а собственные функции $|\psi_\beta\rangle$ оператора будут записаны соотношением

$$|\psi_\beta(a, b)\rangle = \sum_{\alpha i} A_{\beta, \alpha i} |\alpha i\rangle, \quad (1.6)$$

где $A_{\beta, \alpha i}$ – элементы унитарной матрицы A , диагонализующую исходную матрицу H . Следовательно выбрав набор определенных набор функций $|i\rangle$, можно решить задачу. Однако в молекулярной спектроскопии описанная методика является невозможна для решения практических задач, так как функция $|\alpha\rangle$ образует бесконечномерный базис. Вследствие этого диагонализация матрицы H и H' становится невозможной.

Процедуру построения и последующую диагонализацию матрицы H можно выполнить в два этапа:

- 1) построить матрицу $\langle \alpha | H | \beta \rangle$ на функциях $|\alpha\rangle$ (при этом величины $\langle \alpha | H | \beta \rangle$ являются операторами от переменных b);
- 2) построить и диагонализовать матрицу $\langle i | \langle \alpha | H | \beta \rangle | j \rangle$.

Очевидно, что операторная матрица $\langle \alpha | H | \beta \rangle$ будет полностью

заполненная (т. е. все элементы будут не нулевыми (рисунок 3)). Поэтому если построить для операторной матрицы $\langle \alpha | H | \beta \rangle$ числовую $\langle i | \langle \alpha | H | \beta \rangle | j \rangle$, то процедура определения собственных значений и функций сводится к стандартной задаче [9, 10].

	α'_1	α'_2	...	α'_k	α_1^o	α'_n	α_2^o	α'_m	...
α'_1	x	x		x	0	x	0	x	
α'_2	x	x		x	0	x	0	x	
...		
α'_k	x	x		x	0	x	0	x	
α_1^o	0	0		0	x	0	x	0	
α'_n	x	x		x	0	x	0	x	
α_2^o	0	0		0	x	0	x	0	
α'_m	x	x		x	0	x	0	x	
...		

Рисунок 3 – Схема построения эффективного гамильтониана

Однако существует альтернативный вариант, когда вместо оператора H , можно использовать оператор \tilde{H}

$$\tilde{H} = G^+ H G, \quad (1.7)$$

где G – произвольный унитарный оператор с условием, что $(G - 1)$ малый по сравнению с единичным оператором. Такое условие будет выполняться только в том случае, когда оператор G будет в виде

$$G = \exp \left(i \sum_{n=1}^{\infty} g_n(\kappa^n) \right), \quad (1.8)$$

где $g_n = g_n(a, b)$ – малые эрмитовы операторы порядка (κ^n) .

Проделав аналогичную процедуру, как и для исходного оператора H , построим матрицу для эффективного оператора $\langle \alpha | \tilde{H} | \beta \rangle$. Поскольку оператор G пока произвольный, его можно принять в таком виде, что определенные элементы матрицы будут равны нулю. Для этого все

пространство L_α волновых функций $|\alpha\rangle$ разобьём на два подпространства L_{α_0} и $L_{\alpha'}$ так, что $L_\alpha = L_{\alpha_0} + L_{\alpha'}$, причем L_{α_0} должно быть конечномерным. Тогда матричные элементы $\langle \alpha | \tilde{H} | \beta \rangle$ можно разделить на следующие совокупности элементов

$$\langle \alpha^0 | \tilde{H} | \beta^0 \rangle, \langle \alpha^0 | \tilde{H} | \beta' \rangle, \langle \alpha' | \tilde{H} | \beta^0 \rangle \text{ и } \langle \alpha' | \tilde{H} | \beta' \rangle. \quad (1.9)$$

Выберем оператор G таким, чтобы $\langle \alpha^0 | \tilde{H} | \beta' \rangle$ и $\langle \alpha' | \tilde{H} | \beta^0 \rangle$ обращались в нуль. В этом случае матрица $\langle \alpha | \tilde{H} | \beta \rangle$ будет записана в виде (рисунок 3).

Если мы построим числовую матрицу $\langle i | \langle \alpha | \tilde{H} | \beta \rangle | j \rangle$ то она будет иметь вид, что и матрица $\langle \alpha | \tilde{H} | \beta \rangle$. Собственные значения оператора H и \tilde{H} могут быть определены путем диагонализации матрицы $\langle i | \langle \alpha | H | \beta \rangle | j \rangle$. Задача диагонализации матрицы A эквивалентна решению секулярного уравнения

$$\det\{A - Ex\} = 0, \quad (1.10)$$

где E – единичная матрица. Так как определитель матрицы не меняется при перестановке строк и столбцов, матрица (рисунок 3) может быть приведена к матрице (рисунок 4). Отсюда следует, что вся матрица $\langle i | \langle \alpha | \tilde{H} | \beta \rangle | j \rangle$ разбивается на две независимые подматрицы, дальнейшая диагонализация которых может выполняться независимо. Важно, что подматрица $\langle i | \tilde{H}_{\text{эфф}} | j \rangle$ является конечномерной по индексам α и β . Если рассматривать энергетические уровни порождаемые только состояниями $|\alpha_1^0\rangle, |\alpha_2^0\rangle, \dots$ (т.е. состояниями связанными с $\tilde{H}_{\text{эфф}}$) (рисунок 4), то нет необходимости диагонализировать всю матрицу $\langle i | \langle \alpha | \tilde{H} | \beta \rangle | j \rangle$. Достаточно рассмотреть и диагонализировать только ее подматрицу $\langle i | \tilde{H}_{\text{эфф}} | j \rangle$. Оператор $\tilde{H}_{\text{эфф}}$ является эффективным оператором N состояний $|\alpha_1^0\rangle, |\alpha_2^0\rangle, \dots, |\alpha_N^0\rangle$.

$$\begin{bmatrix} & & & 0 & 0 & 0 \\ & \tilde{H}_{\text{эфф}} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ & \vdots & \ddots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & x & x \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}$$

Рисунок 4 – Схема построения эффективного гамильтониана

1.3. Правила отбора

Правила отбора устанавливают возможность энергетических переходов между определенными уровнями энергий, сопровождающиеся излучением или поглощением энергии. Т.е. при переходе из одного состояния в другое, система либо испускает, либо поглощает квант света. Квадрат матричного элемента $\langle \psi_1 | H_{\text{вз}} | \psi_2 \rangle$ определяет вероятность перехода между энергетическими состояниями ψ_1 и ψ_2 . Где $H_{\text{вз}}$ – оператор взаимодействия излучения с веществом. Если величина $\langle \psi_1 | H_{\text{вз}} | \psi_2 \rangle = 0$, то молекула не может перейти из состояния ψ_1 в состояние ψ_2 . Благодаря теории симметрии, можно не проводя вычислений матричных элементов $\langle \psi_1 | H_{\text{вз}} | \psi_2 \rangle$, заведомо знать те, которые равны нулю.

Для этого необходимо провести классификацию волновых функций ψ_1 и ψ_2 взаимодействующих состояний и оператора $H_{\text{вз}}$ по типам симметрии и воспользоваться теоремой Вигнера-Эккарта:

$$\langle \psi_{1\sigma_1}^{(\Gamma_1)} | H_{\text{вз}\sigma}^{(\Gamma)} | \psi_{2\sigma_1}^{(\Gamma_2)} \rangle = F_{(\Gamma_2)\sigma_2(\Gamma)\sigma}^{(\Gamma_1)\sigma_1} \langle \psi_1^{(\Gamma_1)} || H_{\text{вз}}^{(\Gamma)} || \psi_2^{(\Gamma_2)} \rangle. \quad (1.11)$$

Откуда следует, что молекула может перейти из состояния $\psi_1^{(\Gamma_1)}$ в состояние $\psi_2^{(\Gamma_2)}$ [13].

Прямое произведение типов симметрии волновых функций взаимодействующих состояний ψ_1 и ψ_2 ($\Gamma_1 \times \Gamma_2$) содержит тип симметрии Γ оператора взаимодействия, т.е.

$$\Gamma_1 \times \Gamma_2 \supset \Gamma. \quad (1.12)$$

Это условие и составляет суть правил отбора с точки зрения теории симметрии [13].

Молекула $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ представляет собой асимметричный волчок и изоморфна точечной группе симметрии D_{2h} (рисунок 5). Молекулы типа асимметричного волчка имеют три типа колебательных полос. Правила отбора, регулирующие переходы для каждого типа полосы, приведены в таблице 1. Полосы *A*-типа, *B*-типа и *C*-типа создаются, когда переходный дипольный момент выравнивается с осью *a*-, *b*- и *c*-осью, соответственно.

Для разрешенных переходов

1. Если $(\nu\Gamma_1^x\nu'\Gamma_2') = A_1$, тогда соответствующая полоса *a*-типа ($B_{1u} \rightarrow A_g$);
2. Если $(\nu\Gamma_1^x\nu'\Gamma_2') = B_1$, тогда соответствующая полоса *b*-типа ($B_{2u} \rightarrow A_g$);
3. Если $(\nu\Gamma_1^x\nu'\Gamma_2') = B_2$, тогда соответствующая полоса *c*-типа ($B_{3u} \rightarrow A_g$).

Таблица 1 – Правила отбора для *A*, *B*, *C* - типа полос

Тип полосы	ΔJ	ΔK_a	ΔK_c
<i>A</i> -тип	0, ± 1	0, (± 2)	± 1 , (± 3)
<i>B</i> -тип	0, ± 1	± 1 , (± 3 , ± 5 , ...)	± 1 , (± 3 , ± 5 , ...)
<i>C</i> -тип	0, ± 1	± 1 , (± 3 , ± 5 , ...)	0, (± 2 , ± 4 , ...)

Переходы с использованием значений в скобках допускаются, но могут быть слишком слабыми для обнаружения

1.4. Резонансы типа Кориолиса

Поскольку существует много колебательных мод и уровней вращательных энергий для многоатомных молекул, будут случаи, когда уровни вращательной энергии, относящиеся к различным колебательным состояниям, могут быть почти одинаковыми. Это вызывает эффект связи между энергетическими уровнями двух колебательных состояний, которые

смещают эти энергетические уровни от их невозмущенных уровней и, следовательно, влияют на наблюдаемое положение спектральных линий для переходов с этими уровнями. Наиболее часто встречающимся типом связи является резонанс Кориолиса (в частности в данной работе).

Вид взаимодействия зависит от типа полосы (A , B или C). Полоса C -типа, взаимодействующая с полосой B -типа, будет приводить к Кориолису a -типа, полоса C -типа, взаимодействующая с полосой A -типа, приводит к появлению Кориолиса b -типа, а полоса A -типа, взаимодействующая с полосой B -типа, приводит к Кориолису c -типа [14, 15].

Недиагональные блоки $H^{vv'}$ описывают резонансное взаимодействие между колебательными состояниями симметрии u -типа: A_u , B_{1u} , B_{2u} и B_{3u} . В нашем случае, рассматриваемые колебания имеют два типа симметрии B_{2u} и B_{3u} . По этой причине в гамильтониане должно присутствовать только взаимодействие типа Кориолиса, с тремя различными операторами, части которых (пропорциональные iJ_x , iJ_y , iJ_z) преобразуются в соответствии с неприводимыми представлениями.

$$H_{vv'} = iJ_y H_{vv'}^{(1)} + H_{vv'}^{(1)} iJ_y + [J_x, J_y]_+ + H_{vv'}^{(2)} + H_{vv'}^{(2)} [J_x, J_y]_+ + \dots, \quad (1.14)$$

$$H_{vv'} = iJ_x H_{vv'}^{(1)} + H_{vv'}^{(1)} iJ_x + [J_y, J_z]_+ + H_{vv'}^{(2)} + H_{vv'}^{(2)} [J_y, J_z]_+ + \dots, \quad (1.15)$$

$$H_{vv'} = iJ_z H_{vv'}^{(1)} + [J_x, J_y]_+ + H_{vv'}^{(2)} + H_{vv'}^{(2)} [J_x, J_y]_+ + \dots. \quad (1.16)$$

Оператор $H_{vv'}^{(i)}$ ($i = 1, 2$) в общей форме может быть записан

$$H_{vv'}^{(i)} = \frac{1}{2} vv' C^i + vv' C_K^i J_z^2 + \frac{1}{2} vv' C_J^i J^2 + vv' C_{KK}^i J_z^4 + vv' C_{KJ}^i J_z^2 J^2 + \frac{1}{2} vv' C_{JJ}^i J^4 + \dots. \quad (1.17)$$

В свою очередь в колебательно-вращательный гамильтониан входят кориолисовы параметры $\zeta_{\lambda\mu}^a$ (1.18), которые являются функциями трансформационных коэффициентов $l_{N\alpha\lambda}$. Подробное теоретическое описание рассмотрено в работах [16-19].

$$\xi_{\lambda\mu}^{\alpha} = \sum_N (l_{N\beta\lambda} l_{N\gamma\mu} - l_{N\gamma\lambda} l_{N\beta\mu}). \quad (1.18)$$

1.5. Эффект изотопозамещения

Под эффектом изотопозамещения или изотопического смещения понимается изменение свойств изучаемых объектов при переходе из одной изотопической разновидности ядер к другой. Исследование изотопических эффектов в ряде случаев является полезным. Наиболее широкое применение изотопический эффект получил при изучении колебательно-вращательных спектров молекул.

Изотопический эффект впервые наблюдался в молекулярных колебательно-вращательных спектрах в 1920 году для молекулы HCl [20], и с тех пор использование его превратилось в мощный инструмент. В частности, изотоп ^{13}C был обнаружен по изотопическому сдвигу линий молекулярных спектрах [21].

В приближение Борна-Оппенгеймера ряд молекулярных величин зависит только от свойств электронов и не зависит от масс атомов. К таким величинам относятся внутримолекулярная потенциальная функция, равновесная конфигурация, дипольный момент молекулы и т.д. С другой стороны, изотопозамещение изменяет кинетическую энергию ядерной подсистемы, а, следовательно, обуславливает изотопический эффект.

Краткая теория эффекта изотопозамещения представлена в работах [22-25], на основе которой был получен набор простых изотопных соотношений, которые затем использовались для оценки начальных численных значений спектроскопических параметров (колебательные, вращательные, центробежные искажения и параметры резонансного взаимодействия).

Существуют три главные установки для любой изотопической замены в многоатомной молекуле:

1. Набор уравнений, позволяющий либо определять гармонические частоты, ω'_v , любой изотопически замещенной молекулы как функцию гармонических частот ω_λ родительской молекулы и набор коэффициентов $A_{\lambda\mu}$; или наоборот, определить коэффициенты $A_{\lambda\mu}$ как функции мягких гармонических частот родительской и замещенной молекул:

$$\sum_{\lambda} A_{\lambda\mu} \omega_{\lambda}^2 \alpha_{v\lambda} = \alpha_{v\lambda} \omega_{\lambda}^2, \quad (1.19)$$

$\alpha_{v\lambda}$ – дополнительные коэффициенты, которые также определяются из решения уравнения (3.1).

2. Второе соотношение имеет следующий вид (m_N и m_0 – массы атомов до и после изотопической замены):

$$A_{\lambda\mu} = \delta_{\lambda\mu} - \sum_{N\alpha} \frac{(m'_N - m_N)}{m'_N} l_{N\alpha\lambda} l_{N\alpha\mu}, \quad (1.20)$$

и оно определяет коэффициенты $A_{\lambda\mu}$ через так называемые коэффициенты трансформации $l_{N\alpha\lambda}$ родительского изотопомера. Обычно эти коэффициенты трансформации известны для любого родительского изотопомера или могут быть легко получены из набора известных уравнений [26].

3. Третье соотношение имеет вид

$$l'_{N\gamma\lambda} = \sum_{\alpha\mu} K_{\alpha\gamma}^e \sqrt{\frac{m_N}{m'_N}} \frac{l_{N\alpha\lambda}}{\alpha_{\mu\lambda}} \quad (1.21)$$

и оно дает возможность вычислять коэффициенты трансформации замещенных изотопомерных функций с использованием параметров «материнской» молекулы. $K_{\alpha\gamma}^e$ – это матрица, обеспечивающая поворот координатных осей, соответствующих равновесной конфигурации при переходе от основной модификации к изотопозамещенной.

2. Объект и методы исследования

2.1. Общая характеристика исследуемой молекулы

Молекула C_2H_4 является наиболее распространенной в природе, поэтому ее структура исследовалась гораздо чаще и более подробно, чем ее изотопологи. Из года в год пополняются молекулярные базы данных (HITRAN, GEISA) новыми исследованиями по этой молекуле [27-34]. Однако для определения полной и корректной потенциальной функции необходимо обладать информацией о всех изотопологах молекулы этилена. Главной проблемой является то, что многие модификации этой молекулы не были исследованы или же эти исследования проводились много лет тому назад, что говорит о невысокой точности полученной информации. Поэтому в настоящее время активно проводятся исследования всех изотопологов молекулы этилена. В настоящей работе мы продолжаем [35-40] изучение данной молекулы и наше внимание сосредоточенно на изотопологе $^{13}C_2H_4$ в диапазоне $2840-3300\text{ см}^{-1}$. Молекула этилена – это нелинейная молекула с 6 атомами, имеет 12 различных колебательных мод. Равновесная конфигурация молекулы представлена на рисунке 5.

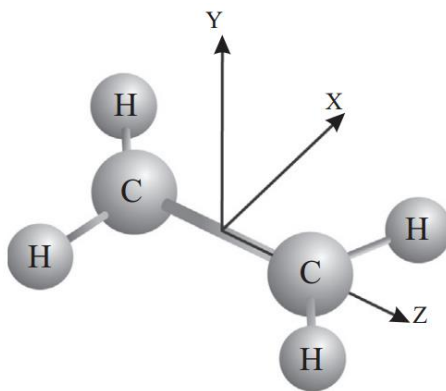


Рисунок 5 – Равновесная конфигурация молекулы $^{13}C_2H_4$

Как говорилось выше, группа симметрии молекулы $^{13}C_2H_4$ изоморфна группе D_{2h} и имеет 8 неприводимых представлений [41]. Свойства симметрии для данной молекулы представлены в таблице 4.

Теоретическое описание такого рода молекул основывается на использовании модели колебательно-вращательного эффективного гамильтониана в A -редукции и F представлении. Общий вид гамильтониана:

$$H^{v..r.} = \sum_{v\tilde{v}} |v\rangle \langle \tilde{v}| H_{v\tilde{v}} \quad (2.1)$$

Диагональные блоки эффективного гамильтониана в выражении (2.2), описывающие вращательную структуру невозмущенных колебательных состояний, взяты в виде оператора Уотсона [42]:

$$\begin{aligned} H_{vv} = & E^v + \left[A^n - \frac{1}{2}(B^v + C^v) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v - C^v) J^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J_{xy}^2 - \Delta_K^v J_z^4 \\ & - \Delta_J^v J_z^2 J^2 - \Delta_J^v J^4 - \delta_K^v [J_z^2, J_{xy}^2] - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 + H_K^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 J^4 + \\ & H_J^v J^6 + [J_{xy}^2, h_K^v J_z^4 + h_{JK}^v J^2 J_z^2 + h_J^v J^4] + L_K^v J_z^8 + L_{KKJ}^v J_z^6 J^2 + L_{JK}^v J_z^4 J^4 + \\ & L_{JJK}^v J_z^2 J^6 + L_J^v J^6 + [J_{xy}^2, l_K^v J_z^6 + l_{KJ}^v J_z^4 J^2 + l_{JK}^v J_z^2 J^4 + l_J^v J^6] + \dots \quad (2.2) \end{aligned}$$

Недиагональные блоки для описания резонансного взаимодействия были описаны в главе 1.4.

Все неприводимые представления группы записаны в виде таблицы характеров (таблица 5), строки которой состоят из сумм диагональных элементов матриц неприводимых представлений (в нашем случае матрицы неприводимых представлений одномерные), а столбцы нумеруются элементами группы.

Таблица 5 – Типы симметрии и характеры неприводимых представлений для D_{2h}

Пред.	E	$\sigma_{x'y'}$	$\sigma_{x'z'}$	$\sigma_{y'z'}$	i	$C_2(z')$	$C_2(y')$	$C_2(x')$	Вращ.	Колеб.
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1		q_1, q_2, q_3
A_u	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1		q_4
B_{1g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	J_y, k_{zy}	q_5, q_6
B_{1u}	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1		q_7
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	J_y, k_{zx}	q_8
B_{2u}	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1		q_9, q_{10}
B_{3g}	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	J_z, k_{zz}	
B_{3u}	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1		q_{11}, q_{12}

где E , $\sigma_{x'y'}$, $\sigma_{x'z'}$, $\sigma_{y'z'}$, i – неприводимые представления, q_i – колебательные координаты, J_a – вращательные операторы, $k_{a\beta}$ – направляющие косинусов.

На рисунке 6 показаны 12 основных колебательных мод этилена $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ [43].

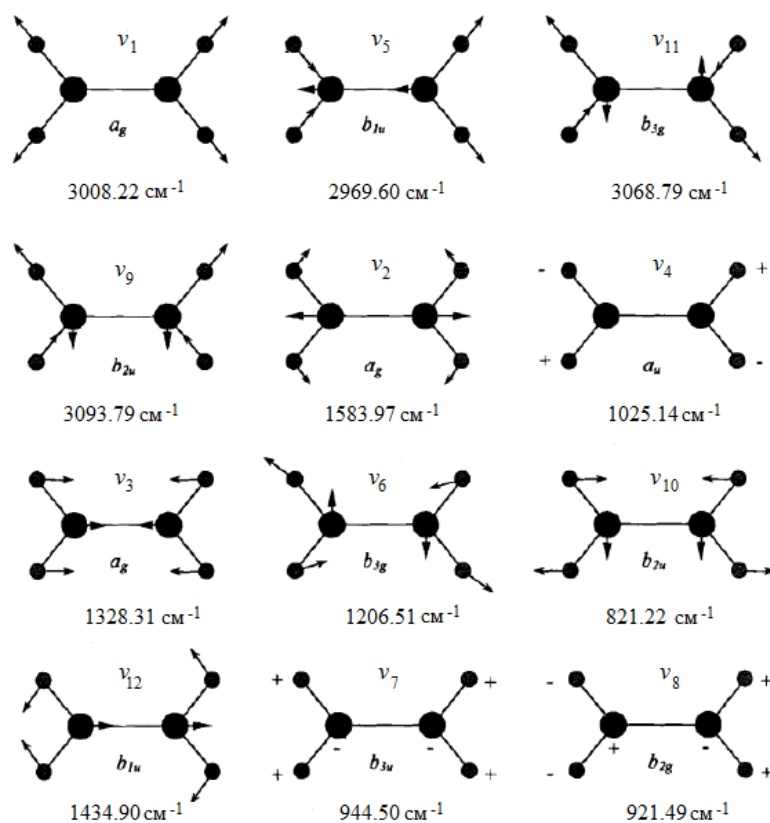


Рисунок 6 – 12 фундаментальных колебательных мод молекулы этилена

2.2. Вычисление комбинационных разностей для анализа молекулярного спектра

Метод комбинационных разностей – это метод, используемый спектроскопистами для получения более точных констант основного состояния для исследуемых колебательных состояний. Рассматриваются вращательные уровни основного ($\nu = 0$) и возбуждённого ($\nu = 1, 2, 3 \dots$) колебательно-вращательных состояний. Согласно правилам отбора, имеется несколько переходов с вращательных уровней основного колебательного состояния на один и тот же уровень возбуждённого колебательного состояния (рисунок 7). Как правило, структура основного колебательного состояния известна с высокой точностью. Также её можно определить из анализа микроволновых спектров [44].

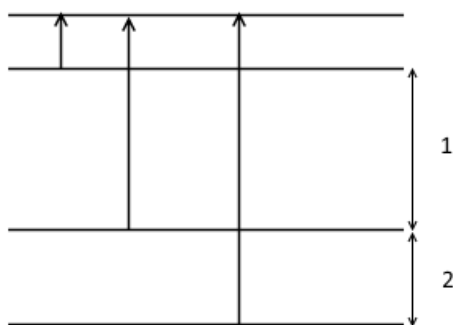


Рисунок 7 – Иллюстрация метода комбинационных разностей

Наша цель – отыскание энергии возбужденного колебательного состояния. Для того, чтобы найти ее нужно предположить на какое примерно расстояние она отстоит от соответствующей энергии невозбужденного состояния. Расстояния между вращательными уровнями основного колебательного состояния нам уже точно известны. Можно сделать «линейку», расстояния между делениями которой будут соответствовать расстояниям между вращательными уровнями основного колебательного состояния (1 и 2 на рисунок 8).

Допустим, мы составили «линейку» из трех делений. Будем двигать «линейку» по спектру. В спектре необходимо найти такие три линии, которые совпадут с делениями линейки (рисунок 7). Знание положений энергий основного состояния, длины волн переходов, можно определить энергии возбужденных состояний (верхних уровней). Если будем «линейку» двигать по спектру, то можем обнаружить ещё несколько линий, которые совпадут с делениями «линейки». Из числа выбранных таким образом линий нужно найти верную комбинацию. Описанный процесс является одним из способов интерпретацией линий [45].

Конечно, точное совпадение линий спектра с делениями линейки в процессе идентификации маловероятно. Поэтому задается точность поиска d . Это значит, что при отклонении центра линии спектра от деления «линейки» на величину меньшую или равную d линия попадает в выборку.

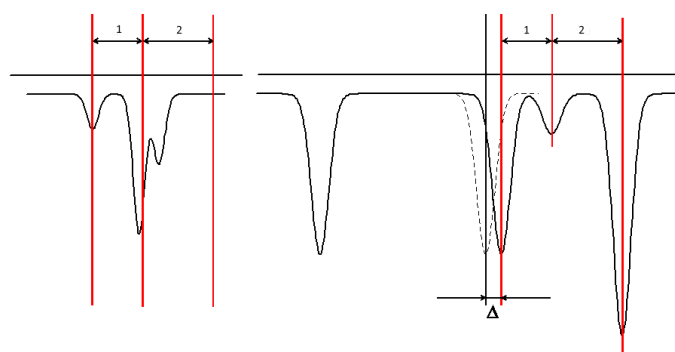


Рисунок 8 – «Линейка» движется по спектру

3. Результаты и обсуждения

3.1. Условия и детали эксперимента

Для получения инфракрасного спектра высокого разрешения молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ в диапазоне $2840\text{--}3300\text{ см}^{-1}$ был использован Фурье-спектрометр Bruker 120HR, который находится в Техническом университете Брауншвейга в Германии. Спектрометр содержит средне-

инфракрасный источник карбида кремния Globar, высокочувствительный детектор, охлаждаемый жидким азотом, и KBr-светоделитель. При регистрации спектра использовался образец $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ с химической чистотой более 99%, приобретенный в Кембриджской Изотопной Лаборатория, Великобритания.

Базовая конфигурация спектрометра включает спектрофотометр Bruker 120HR, подключенный к системе газообработки и к компьютеру, где спектральные данные могут быть просмотрены с помощью программного обеспечения пользователя Optics (OPUS). Программное обеспечение OPUS, разработанное Bruker Corporation, используется в процессах управления прибором и сбора данных.

Положение линий вычислялись с помощью оптимизированного метода центра тяжести, рассмотренного в работе [46]. Окончательное спектральное разрешение в основном ограничивалось доплеровским уширением и приводило к $0,0032\text{ см}^{-1}$. Вклад уширения давления в конечное спектральное разрешение является предельным для образцов с давлением до нескольких сотен Па. Точность волнового числа несмешанных, ненасыщенных и не слишком слабых линий может быть оценена 10^4 см^{-1} в представленной спектральной области.

Детали эксперимента представлены в таблицах 6 и 7. Зарегистрированный спектр в исследуемом диапазоне представлен на рисунке 9.

Таблица 6 – Экспериментальные данные зарегистрированного спектра молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$

Region, cm^{-1}	Resolution, cm^{-1}	Источник	Детектор	Число сканирований
2800-3400	0.003	Globar	InSb	700

Таблица 7 – Экспериментальные данные зарегистрированного спектра
молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$

Оптическая длина пути, м	Разделитель луча	Температура, К	Давление, Па
24	KBr	300	200

3.2. Изотопическое смещение $^{12}\text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow ^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ и параметры Кориолиса

Если решаются уравнения (1.19) – (1.21) для изотопической замены $^{12}\text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow ^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ с учетом, что значения ангармонических коэффициентов $x_{\lambda\mu}$ практически не изменяются, то при такой замене, можно показать, что центры полос ν_{11} и ν_9 сдвинуты для изотопической замены на значения, представленные в таблице 9. Во втором и третьем столбце представлены экспериментальные и расчетные значения для центров полос ^{13}C и ^{12}C изотопологов, соответственно, и в четвертом столбце рассчитана разница между соответствующими значениями центров полос.

Таблица 9 – Значения сдвигов центров полос ν_9 , ν_{11} и $\nu_2+\nu_{12}$ для молекул
 $^{12}\text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow ^{13}\text{C}_2\text{H}_4$

Полоса	^{13}C		^{12}C		Сдвиг Δ		
	Эксп.	Расч.	Эксп.	Расч.	Δ Калк.	Δ Эксп.	Δ
$\nu_{11} (B_{3u})$	2069.60	2069.6013	2988.63	2985.35	18.88	19.03	0.15
$\nu_2+\nu_{12} (B_{3u})$	3018.71	3018.7477	3078.46	-	-	-	-
$\nu_9 (B_{2u})$	2093.78	3093.7986	3104.33	3101.65	11.13	7.85	-3.27

Результаты, представленные в главе 1.4.-1.5. были использованы для численных оценок наиболее важных спектроскопических параметров взаимодействующих состояний молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$. Оценки гармонических частот были выполнены в соответствии с уравнениями (1.19) – (1.21), решение которых позволило определить в работе [47] константы форм колебаний $l_{N\alpha\lambda}$ молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ (значения отличных от нуля $l_{N\alpha\lambda}$ параметров

приведены в таблице 9). Знание гармонических частот, а также формула (1.18) позволяет на основе общей теории колебательно-вращательных взаимодействий в молекулах получить резонансные параметры.

Таблица 9 – Константы форм колебаний $l'_{Na\lambda}$ молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$

N	β	λ	$l_{Na\lambda}$	N	β	λ	$l'_{Na\lambda}$	N	β	λ	$l_{Na\lambda}$	N	β	λ	$l'_{Na\lambda}$	N	β	λ	$l_{Na\lambda}$
1	x	1	-0.21427	2	x	3	0.42877	1	x	6	0.10948	1	x	9	0.21851	2	x	11	0.43440
1	z	1	0.19988	2	z	3	-0.23119	1	z	6	-0.38895	1	z	9	-0.44141	2	z	11	-0.23036
2	x	1	0.21427	3	x	3	0.42877	2	x	6	0.10948	2	x	9	0.21851	3	x	11	-0.43440
2	z	1	0.19988	3	z	3	0.23119	2	z	6	0.38895	2	z	9	0.44141	3	z	11	-0.23036
3	x	1	0.21427	4	x	3	-0.42877	3	x	6	-0.10948	3	x	9	0.21851	4	x	11	0.43440
3	z	1	-0.19988	4	z	3	0.23119	3	z	6	0.38895	3	z	9	-0.44141	4	z	11	-0.23036
4	x	1	-0.21427	5	z	3	0.15939	4	x	6	-0.10948	4	x	9	0.21851	5	z	11	0.12826
4	z	1	-0.19988	6	z	3	-0.15939	4	z	6	-0.38895	4	z	9	-0.44141	6	z	11	0.12826
5	z	1	-0.57294	1	y	4	0.50000	5	x	6	-0.41648	5	x	9	-0.12166	1	x	12	0.24757
6	z	1	0.57294	2	y	4	-0.50000	6	x	6	0.41648	6	x	9	-0.12166	1	z	12	-0.40420
1	x	2	0.14226	3	y	4	0.50000	1	y	7	0.46524	1	x	10	-0.41073	2	x	12	-0.24757
1	z	2	-0.39572	4	y	4	-0.50000	2	y	7	0.46524	1	z	10	-0.23483	2	z	12	-0.40420
2	x	2	-0.14226	1	x	5	-0.41123	3	y	7	0.46524	2	x	10	-0.41073	3	x	12	0.24757
2	z	2	-0.39572	1	x	5	0.23597	4	y	7	0.46524	2	z	10	0.23483	3	z	12	-0.40420
3	x	2	-0.14226	2	x	5	0.41123	5	y	7	-0.25904	3	x	10	-0.41073	4	x	12	-0.24757
3	z	2	0.39572	2	z	5	0.23597	6	y	7	-0.25904	3	z	10	-0.23483	4	z	12	-0.40420
4	x	2	0.14226	3	x	5	0.41123	1	y	8	0.40837	4	x	10	-0.41073	5	z	12	0.22505
4	z	2	0.39572	3	z	5	0.23597	2	y	8	0.40837	4	z	10	0.23483	6	z	12	0.22505
5	z	2	-0.38252	4	x	5	0.41123	3	y	8	-0.40837	5	x	10	0.22869				
6	z	2	0.38252	4	z	5	-0.23597	4	y	8	-0.40837	6	x	10	0.22869				
1	x	3	-0.42877	5	x	5	0.22452	5	y	8	-0.40798	1	x	11	-0.43440				
1	z	3	-0.23119	6	x	5	-0.22452	6	y	8	0.40798	1	z	11	-0.23036				

Полученные результаты были применены при анализе фурье-спектра высокого разрешения, который будет представлен в последующих главах. Особенностью спектра молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ в данном диапазоне является наличие сильных резонансных взаимодействий между всеми колебательными компонентами. В колебательно-вращательной спектроскопии известно, что анализ таких спектров с последующим решением обратной спектроскопической задачи относится к разряду «некорректных» задач.

Физически разумные параметры модели (гамильтониана), положенной в основу анализа, возможно получить, лишь теоретически оценив и фиксируя часть из параметров модели. Наиболее

«проблемными» при этом являются параметры, связанные с главными вкладами в резонансные части гамильтониана молекулы (в нашем случае – параметры из таблицы 10). Поэтому их корректная численная оценка является основой последующего разумного с физической точки зрения анализа экспериментальных данных. Чтобы оценить точность теоретически предсказанных и приведенных в таблице 10 резонансных параметров, была выполнена предварительная интерпретация нижних по квантовому числу J переходов и оценены «экспериментальные» значения сдвигов центров полос (таблица 8). Как можно видеть, теоретически предсказанные значения параметров очень хорошо согласуются с соответствующими экспериментальными значениями. Данное обстоятельство позволяет надеяться, что выполненные в рамках той же самой процедуры оценки параметров резонансных взаимодействий (приведенные в таблице 10) являются также корректными и их можно использовать в последующем анализе высокоточных экспериментальных данных.

Таблица 10 – Значения параметров главных кориолисовых постоянных для некоторых колебательных состояний молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$

$\zeta_{\lambda\mu}^a$	Значение, ^{13}C
9/11	-1.42
9/2+12	-4.51

3.3. Описание спектров и определение переходов

В работе были впервые исследованы две фундаментальные полосы ν_9 и ν_{11} (b -типа), и одна комбинационная полоса $\nu_2+\nu_{12}$ (c -типа). Исследуемый спектр в диапазоне 2840-3300 cm^{-1} , куда входят перечисленные полосы представлен на рисунке 9. Для демонстрации высокого разрешения эксперимента на рисунках 10 и 11 приведены фрагменты спектра с большим увеличением.

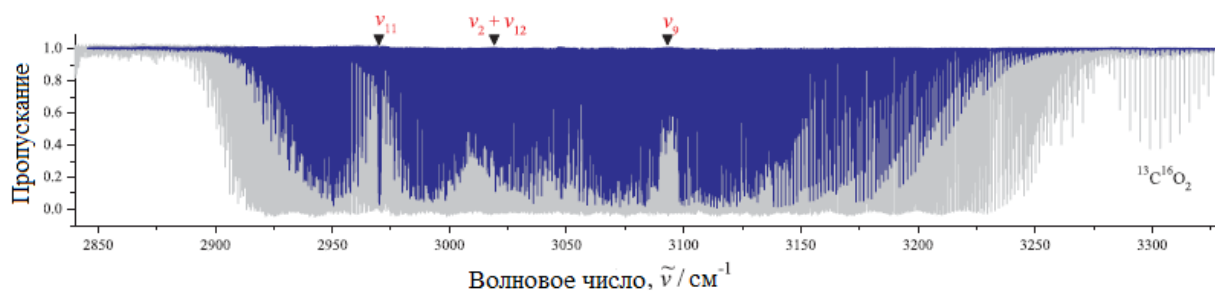


Рисунок 9 – Экспериментальный спектр молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ в диапазоне 2840-3300 см^{-1}

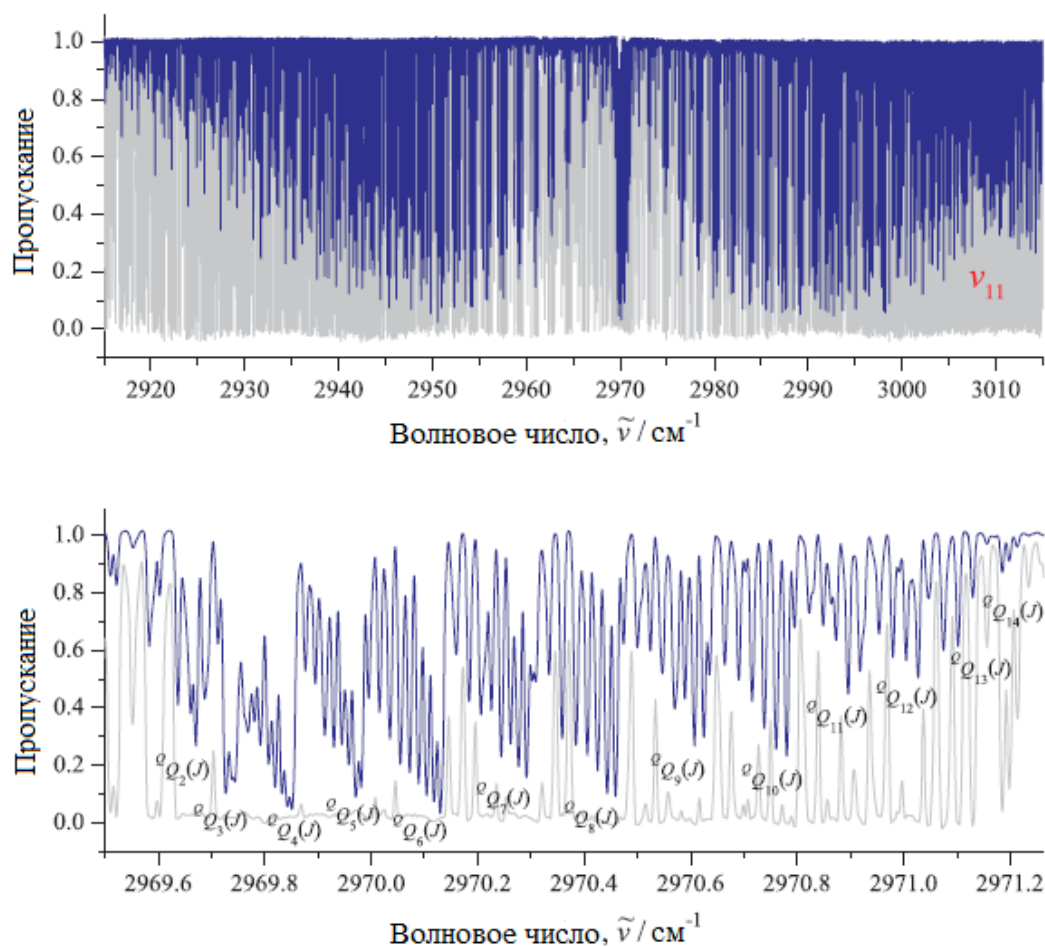


Рисунок 10 – Фрагмент экспериментального спектра полосы ν_{11} (Q-ветка)

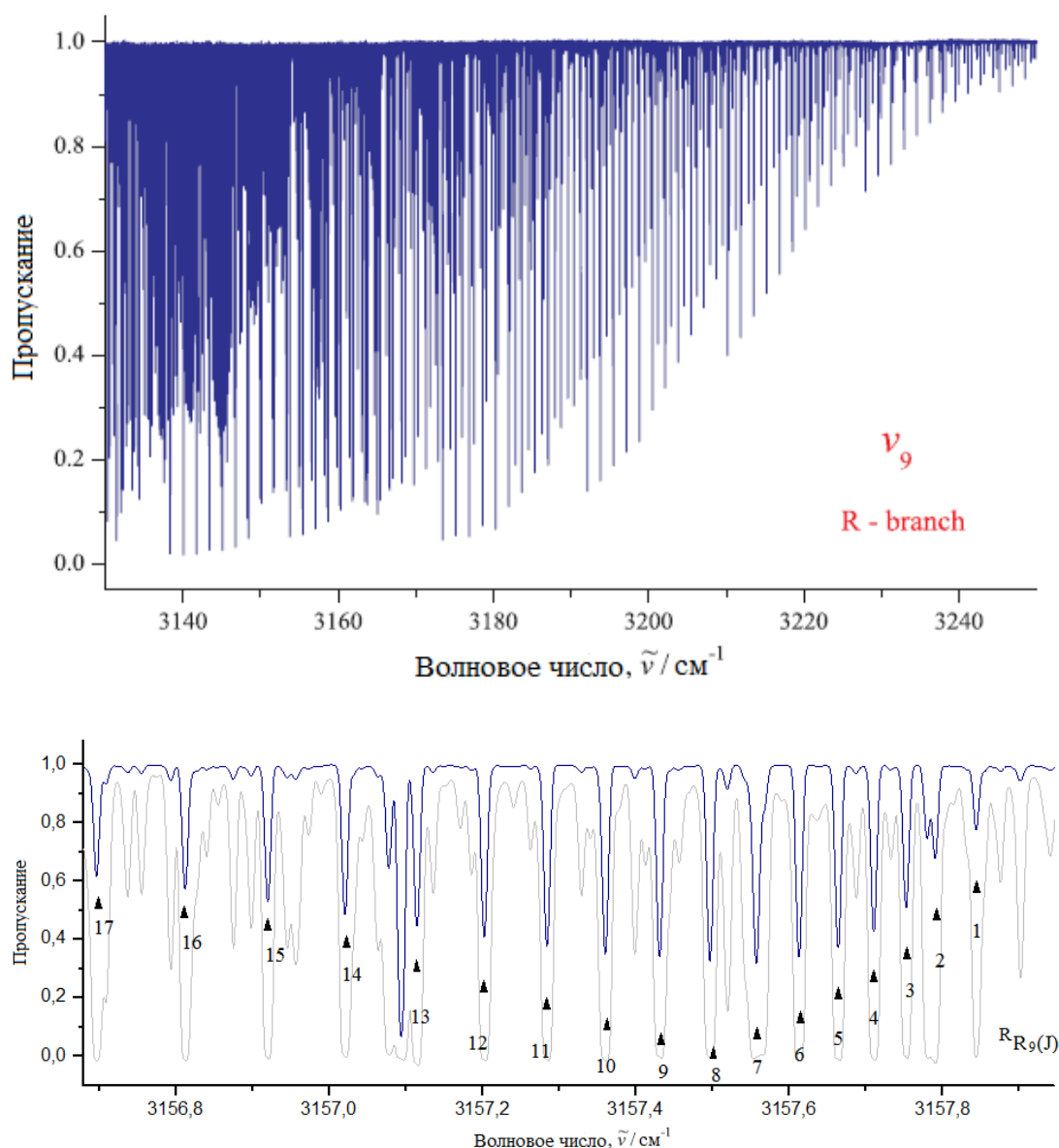


Рисунок 11 – Фрагмент экспериментального спектра полосы ν_9 (R-ветка)

Наиболее интенсивными полосами в спектре являются ν_9 и ν_{11} , это видно из спектра, представленного на рисунке выше. Комбинационная полоса $\nu_2 + \nu_{12}$ выражена более слабо, это связано с наличием относящихся к ней переходов, которые зависят от близлежащих полос. Поэтому она не может иметь высокую относительную интенсивность.

В настоящей работе интерпретация спектра проводилась на основе метода комбинационных разностей. Для расчета вращательных энергий основного колебательного состояния были взяты параметры из работы [36]. В результате анализа выше представленных полос, было определено

порядка 6000 энергетических переходов и 1873 энергий возбужденных состояний. Соответствующие полученным значениям энергий были определены максимальные квантовые числа, представленные в таблице 11.

Таблица 11 – Статистическая информация исследуемых полос молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$

Состояние	Центр полосы, cm^{-1}	J	K_a	N_t	N_l
$\nu_{11} (B_{3u})$	2969.6013	38	15	2558	802
$\nu_2 + \nu_{12} (B_{3u})$	3018.7477	22	9	447	230
$\nu_9 (B_{2u})$	3093.7986	45	17	3122	841

где N_t – количество определённых переходов, N_l – количество полученных энергий, возбужденных состояний.

Для каждого состояния были определены центры, значения которых представлены в таблице 11.

Для иллюстрации приведена часть переходов вместе со значениями пропуска, которые принадлежат полосам ν_9 и ν_{11} и соответствующие значения колебательно-вращательных энергий возбужденного состояния, которые были получены из положений экспериментальных линий (Таблица 12). Полный набор найденных энергетических переходов для исследуемых полос представлен в приложение А.

Подробная информация о качества анализа содержится на рисунке 12, который демонстрирует зависимость разницы между экспериментальным и теоретическими вычислениями положениями линий от квантового числа J . Из графика следует, что экспериментальные и расчетные результаты имеют хорошее совпадение.

Таблица 12 – Часть переходов принадлежащие полосам ν_9 и ν_{11} молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$

J	K_a	K_c	J'	K'_a	K'_c	Положение линии, см^{-1}	I , %	E , см^{-1}	$\delta^a \cdot 10^{-4}$, см^{-1}
ν_{11}									
5	5	d	5	5	d	2969.9812	12.1	3095.9024	1
			6	5	d	2959.5102	65.4	3095.9026	
6	5	d	5	5	d	2880.4421	60.7	3106.3633	1
			6	5	d	2969.9710	9.0	3106.3634	
			7	5	d	2957.7518	46.9	3106.3632	
7	5	d	6	5	d	2982.1773	41.1	3118.5697	0
			7	5	d	2969.9581	20.2	3118.5695	
			8	5	d	2955.9907	36.3	3118.5699	
8	5	d	7	5	d	2983.9124	32.0	3132.5238	0
			8	5	d	2969.9448	27.1	3132.5239	
			9	5	d	2954.2267	30.5	3132.5238	
ν_9									
5	5	d	4	4	d	3138.3693	1.9	3219.6716	-1
			5	4	d	3129.6417	39.9	3219.6719	
			6	6	d	3039.4319	8.6	3219.6717	
6	5	d	5	4	d	3140.0726	1.7	3230.1028	1
			6	4	d	3129.5965	20.8	3230.1032	
			7	6	d	3037.6494	8.9	3230.1030	
7	5	d	6	4	d	3141.7691	1.8	3242.2758	-2
			7	4	d	3129.5423	12.7	3242.2761	
			8	6	d	3035.8623	3.8	3242.2767	
8	5	d	7	4	d	3143.4578	2.7	3256.1913	4
			8	4	d	3129.4789	8.5	3256.1921	
			9	6	d	3034.0687	10.1	3256.1916	

где $J K_a K_c$ – верхние переходы, $J' K'_a K'_c$ – нижние переходы, I – пропускание, E – энергия возбужденного состояния, δ_a – разница между экспериментальным значением энергии и расчетным.

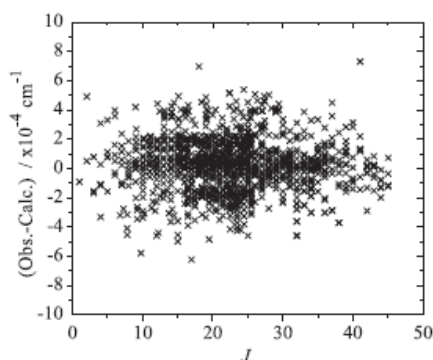


Рисунок 12 – Экспериментально-рассчитанные значения для исследованных колебательных состояний молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$

3.4. Анализ структуры взаимодействующих полос ν_9 , ν_{11} и $\nu_2+\nu_{12}$

Для фиттинга исследуемых переходов использовалась программа, основанная на методе наименьших квадратов. В основе данной программы лежит гамильтониан Уотсона с представлением I' A-редукции (глава 2.1.). Полученные значения энергий из эксперимента варьировались на основе этого гамильтониана. Параметры основного состояния были взяты из нашей предыдущей работы [36] и были использованы в настоящей как начальные значения для подгонки. Исходя из основной колебательно-вращательной теории – диагональные параметры могут отличаться от невозбужденного (основного) колебательного состояния не более чем на несколько процентов [16]. Для исследуемых полос варьировались только центры, колебательные параметры и центробежное искажение. Значения параметров центробежного искажения сравнимые или меньше статистического доверительного интервала принимались равными первоначальному значению и фиксировались. Для достижения удовлетворительного соответствия между теоретическими и экспериментальными результатами было использовано больше параметров резонанного взаимодействия, чем обычно используется в аналогичных процедурах. Отметим, что относительно большое количество параметров резонанного взаимодействия в модели может быть объяснено сложной картиной

колебательно-вращательной структуры взаимодействующих состояний, рассматриваемых в данной работе.

Результаты варьирования параметров гамильтониана представлены в таблице 11. Значения в скобках являются доверительным интервалом, остальные параметры представлены без доверительного интервала и были взяты из основного состояния. Параметры для полосы ν_{11} были получены ранее в работе [40]. В данной работе параметры для этой полосы были улучшены и можно наблюдать хорошую корреляцию между ними. Полученный набор параметров – 82 параметра – воспроизводит начальные экспериментальные данные (1873 значений энергий возбужденных состояний и более 6000 переходов) с точностью $d_{\text{rms}} = 3.8 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$.

Таблица 11 – Спектроскопические параметры колебательных состояний

ν_9, ν_{11} и $\nu_2+\nu_{12}$ молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$

Параметры	$\nu_{11} = 1, \text{ см}^{-1}$	$\nu_2+\nu_{12} = 1, \text{ см}^{-1}$	$\nu_9 = 1, \text{ см}^{-1}$
E	2969.6013 (19)	3018.7477 (37)	3093.7986 (92)
A	4.88125 (12)	0.4881 (25)	0.48811 (60)
B	0.952174 (22)	0.9521 (74)	0.95217 (54)
C	0.789821 (22)	0.789821 (21)	0.78979 (39)
$\Delta_J \cdot 10^4$	0.01458 (53)	0.13352 (12)	0.87017 (43)
$\Delta_{JK} \cdot 10^4$	-0.0618 (24)	0.9815 (48)	0.98152 (97)
$\Delta_K \cdot 10^4$	1.526 (23)	0.133 (71)	0.133 (86)
$\delta_J \cdot 10^4$	0.0953733 (63)	0.628 (12)	0.6289 (47)
$\delta_K \cdot 10^4$	0.002452716	-0.431669	-0.431669
$H_J \cdot 10^8$	0.00029659	0.00029659	0.00029659
$H_{JK} \cdot 10^8$	0.0166920	0.0166920	0.0166920
$H_{KJ} \cdot 10^8$	0.0431669	0.0431669	0.0431669
$H_K \cdot 10^8$	0.628947	0.628947	0.628947

где E – центр полосы, A , B и C – вращательные постоянные, Δ_K , Δ_{JK} , Δ_J – параметры центробежного искажения δ_J , δ_K – квадратичные центробежные постоянные, H_J , H_{JK} , H_{KJ} , H_K – секстичные центробежные постоянные, значения в скобках – доверительный интервал.

На рисунке 13 показано резонансное взаимодействие между различными колебательными состояниями: F обозначает взаимодействия между состояниями одной и той же симметрии – Ферми-взаимодействие; ζ обозначают взаимодействия типа Кориолиса.

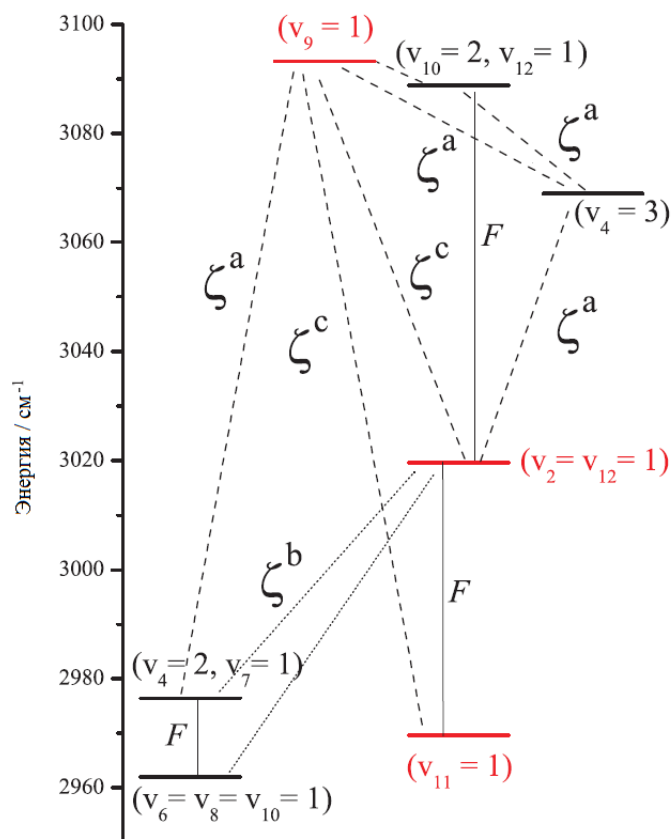


Рисунок 13 – Колебательно-вращательные уровни в области 2840-3300 cm^{-1} молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}$

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ И РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
ОБМ61	Кузнецов Алексей Валерьевич

Школа	ИШЯТ	Отделение	Экспериментальная физика
Уровень образования	Магистр	Направление/специальность	Физика

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент и ресурсоэффективность»

1. Оценка сильных и слабых сторон	Оценка сильных и слабых сторон проекта, включая возможности и угрозы
2. Организационная структура и план проекта	Определение научно-исследовательского состава, их ролей, функций и оценка трудозатрат
3. Бюджет научного исследования	Планирование бюджета исследования
4. Расчет научно-технического эффекта	Определение эффективности исследования на основе расчета научно-технического эффекта

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Планирование научного исследования	Планирование работ; построение иерархической структуры ВКР
2. Планирование и формирование бюджета научных исследований	Планирование бюджета исследовательского проекта
3. Расчет научно-технического эффекта	Оценка научно-технического эффекта

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

--	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент	Верховская М.В.	К.Э.Н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ61	Кузнецов Алексей Валерьевич		

5. Финансовый менеджмент

5.1. Проект и его сильные и слабые стороны

Работа направлена на решение одной из фундаментальных проблем физики микромира, связанной с получением новой физической информации как качественного, так и количественного характера о структуре и внутренних свойствах различных, но, вместе с тем, конкретных многоатомных молекул представляющих интерес для задач астрофизики, физики и химии атмосфер Земли, планет солнечной системы и экзо-планет, неразрушающего контроля, лазерной физики, получения сверхчистых материалов и многих других проблем науки и техники.

Конкретная задача, которая будет решаться, может быть сформулирована следующим образом: «Анализ современной экспериментальной информации о тонкой структуре их колебательно-вращательных спектров».

Важным этапом является описание сильных и слабых сторон проекта, в выявлении возможностей и угроз для реализации проекта, которые проявились или могут появиться в его внешней среде. Результаты представлены таблице 12.

Главной сильной стороной является – научная новизна. Все исследования реальных спектров высокого разрешения выполняются впервые. Большой опыт коллектива в решении подобного рода вопросов позволяет надеяться на успешное решение всех упомянутой в проекте задачи. Экспериментальная часть работ выполняется в кооперации с университетом Брауншвейга (Германия), что является дополнительной гарантией актуальности, новизны и достижимости решения поставленных задач и возможности получения запланированных результатов. Также к сильным сторонам можно отнести имеющийся у исследовательского

коллектива научный задел по проекту, наличие опыта совместной реализации проектов.

Главная возможность – конкурентоспособность. Основные мировые научные конкуренты:

1. Группа Теннисона (J. Tennison, Department of Physics and Astronomy, University College London, UK).

2. Группа Браун (L. R. Brown, Jet Propulsion Laboratory. California Institute of Technology, Pasadena, USA).

3. Группа Фло-Пеппин (J.-M. Flaud, A. Perrin, Laboratoire Inter-Universitaire des Systemes Atmospheriques (LISA), Creteil, France).

4. Группа Кампарга (A. Campargue, Laboratoire de spectrometrie physique UMR 5588, Univeriste Joseph Fourier/CNRS, Grenoble, France).

Основной слабой стороной является длительность исследования и нестабильность финансирования, что влечет за собой торможение всей работы.

Таблица 12 – Сильные и слабые стороны проекта

Сильные стороны проекта	Слабые стороны проекта
C1. Собственные разработки	СЛ1. Длительность исследования
C2. Актуальное исследование	СЛ2. Нестабильное финансирование
C3. Оригинальность решения поставленной задачи	СЛ3.Отсутствие доступа к коллективным исследованиям
C4.Уникальный научный состав	СЛ4. Большой срок поставки данных
C5. Наличие всех материалов для иссл.	
Возможности	Угрозы
B1. Интерес к аналогичным исследованиям со стороны иностранных партнеров	У1.Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования
B2. Конкурентоспособность исследований	У2. Отсутствие спроса на исследовательскую работу
B3. Выход на международный уровень	У3.Ограничения на экспорт результатов исследования
B4.Создание новых методик иссл.	

Следующий этап состоит в выявлении соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды. В рамках данного этапа необходимо построить интерактивную матрицу проекта. Каждый фактор помечается либо знаком «+» (означает сильное соответствие сильных сторон возможностям), либо знаком «-» (что означает слабое соответствие); «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» или «-». Интерактивная матрица проекта представлен в таблице 13.

Таблица 13 – Интерактивная матрица проекта

		Сильные стороны проекта				
		C1	C2	C3	C4	C5
Возможности проекта	B1	+	+	–	–	–
	B2	+	+	–	+	+
	B3	+	+	+	+	+
	B4	+	+	+	+	

Приведённый анализ показал, что исследовательский проект, находясь на этапе разработки, имеет хорошие шансы на коммерциализацию, с учетом проявляемого интереса партнеров и удачных исследований, а также является конкурентоспособным.

5.2. Диаграмма Исикавы

Диаграмма причины-следствия Исикавы (Cause-and-Effect-Diagram) – это графический метод анализа и формирования причинно-следственных связей, инструментальное средство для систематического определения причин проблемы и последующего графического представления.

Область применения диаграммы:

1. Выявление причин возникновения проблемы;
2. Анализ и структурирование процессов на предприятии;
3. Оценка причинно-следственных связей.

Проблемной областью проекта является несвоевременное и некачественное получение результата. Факторы, влияющие на объект анализа:

1. Исследовательская группа;
2. Оборудование;
3. Методы;
4. Материалы.

Существует ряд причин, которые оказывают на это влияние.

1. Оборудование. Экспериментальные данные, которые необходимы для исследования, получаются на установке Bruker 120 HR. Данная установка позволяет получать спектры молекул с хорошим разрешением, однако она обладает невысокой производительностью для снятия спектра в ближнем инфракрасном диапазоне. Решением данной проблемы является Bruker 125 HR, который значительно лучше с точки зрения производительности, так как он имеет девятикамерную конструкцию и оснащен современной цифровой технологией обработки. Также 120-ая версия имеет не высокий предел обнаружения по сравнению со 125 версией, то есть необходимость использовать Bruker 125, который позволяет увеличить предел обнаружения. Следовательно, для улучшения качества и производительности работы необходимо приобрести установку последней версии.

Программное обеспечение OPUS используется для управления спектрометром, а также для оценки записанных спектров. Программное обеспечение для машины Bruker IFS 120 имеет малый функционал по

сравнению со 125 версией, следовательно, целесообразно обновить программный продукт.

2. Материалы исследования. Теоретическое исследование молекул построено на интерпретации колебательно-вращательных молекулярных спектров. Для корректного описания молекулярного спектра необходимо получать спектры с наиболее четкой структурой. Большой вклад делает чистота образца. Образцы сомнительной чистоты приводят к неточному и некорректному описанию полученных экспериментальных данных. Это влечет за собой к понижению качества исследований. Для решения данной проблемы необходимо закупать образцы чистотой не меньше 99%.

Не менее важной проблемой является сроки подготовки и поставки образцов. Долгая подготовка и поставка тормозит исследование. Лучшее решение – выбор надежных поставщиков, например, Кембриджская Изотопная Лаборатория, Великобритания.

3. Методы. Существует необходимость постоянного создания новых методик и написания программных продуктов для проведения исследований. В частности, исследование сосредоточено на анализе внутренней структуры молекул. Так как каждая молекула имеет определенные особенности внутренней структуры (число атомов, тип симметрии и т.д.), то для каждой задачи необходимы свои методы исследования. Создание новых методов и программ (которые позволяют проводить исследование) является крайне трудоемкой и времязатратной работой. Наиболее эффективным решением в данном случае будет расширение научного персонала. Это позволит увеличить результативность работы, а также сократить время на написание новых программ.

4. Исполнители. Первой причиной является нехватка научных сотрудников. Это может привести к увеличению сроков исследований. Устранение данной проблемы можно реализовать за счет расширения

научной группы, например, привлечение студентов старших курсов и аспирантов.

Второй причиной является загруженность по учебной и научной деятельности. Данная проблема также приводит к увеличению сроков исследования. Оптимальное решение данной проблемы – уменьшение преподавательской нагрузки для профессоров и научных сотрудников.

На рисунке 14 представлена причинно-следственная диаграмма (диаграмма Исикавы).

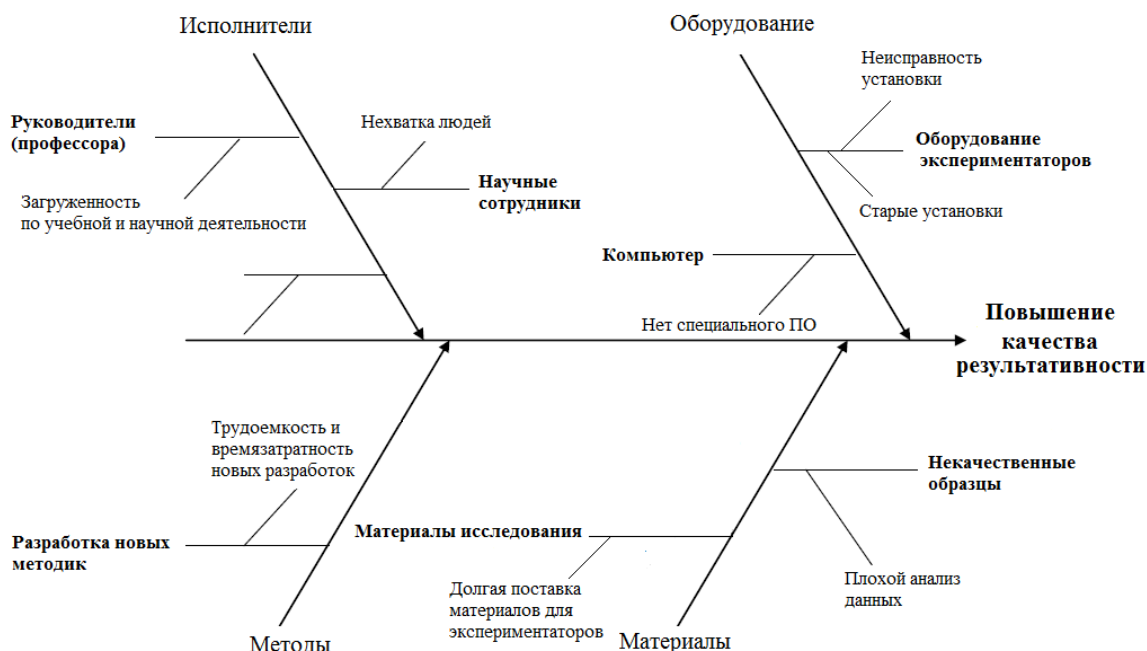


Рисунок 14 – Причинно-следственная диаграмма

Исходя из вышесказанного, можно установить, что для повышения качества анализа экспериментальных данных в первую очередь необходимо приобрести новейшее экспериментальное оборудование и расширить научный персонал.

5.3. Организационная структура и план проекта

На данном этапе работы необходимо решить следующие вопросы: календарный план проекта, кто будет входить в рабочую группу, определить роль каждого участника в данном проекте, а также прописать функции, выполняемые каждым из участников и их трудозатраты в проекте.

Для определения общего содержания работ, уточнения целей и разработки последовательных действий необходимо составить календарный график выполнения НИОКР (таблицы 14 и 15)

Таблица 14 – Календарный план контрольных событий проект

Событие	D_k	D_p	Дата нач.	Дата оконч.	Участники
Разработка и утверждение ТЗ	3	2	04.09.2017	07.09.2017	Рук.
Получение результатов эксперимента	43	29	02.09.2017	15.10.2017	Инж.
Подбор и изучение научно-технической литературы по теме	43	29	08.09.2017	15.10.2017	Инж.
Проведение теоретического исследования	74	50	16.10.2017	10.02.2018	Инж.
Анализ и обработка результатов	44	29	11.02.2018	27.03.2018	Инж.
Оценка полученных результатов	9	6	28.03.2018	07.04.2018	Рук.
Написание магистерской диссертации	47	31	08.04.2018	25.05.2018	Инж.

* С учетом праздников и выходных, где D_k – календарные дни, D_p – рабочие дни.

Коэффициент календарности рассчитывается как

$$k_{\text{кол}} = \frac{Q_{\Gamma}}{Q_{\Gamma} - Q_{\text{вых}} - Q_{\text{произ}}} = 1,48.$$

где Q_{Γ} – количество дней в году, $Q_{\text{вых}}$ – количество всех выходных.

Для перевода календарных дней в рабочие

$$T_p = \frac{T_{\text{к}}}{k_{\text{кол}}}.$$

Информация об участниках проекта представлена в таблице 16.

Таблица 15 – Календарный план контрольных событий проект

Событие	Продолжительность														
	Сент.			Окт.			Нояб.			Дек.			Янв.		
	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
Разработка и утверждение ТЗ	■														
Получение результатов эксперимента				■											
Подбор и изучение научно-технической литературы по теме				■											
Проведение теоретического исследования							■			■					
Анализ и обработка результатов													■		
Оценка полученных результатов															■
Написание магистерской диссертации															■

■ – руководитель, ■ – исполнитель 1, ■ – исполнитель 2.

Таблица 16 – Рабочая группа проекта

ФИО, должность Место работы	Роль в проекте	Функции
Громова О.В. Профессор, ТПУ	Руководитель	1. Разработка ТЗ* 2. Программное обеспечение 3. Оценка полученных результатов
Кузнецов А.В. Магистр, ТПУ	Инженер	1. Изучение литературы по текущему исследованию 2. Проведение теоретического исследования 3. Анализ и обработка полученных результатов 4. Написание выпускной работы (статей)

*ТЗ – Техническое задание

5.4. Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения. В процессе формирования бюджета учитываются только затраты на материалы для исследования и заработную плату участникам проекта.

Расчет стоимости материальных затрат производится по действующим прейскурантам или договорным ценам. Результаты по данной статье занесены в таблицу 17.

Таблица 17 – Материальные затраты

Наименование	Количество, ед	Цена за ед., руб	Сумма, руб
Бумага	5	500	2500
Краска для принтера	5	1000	5000
Итого			7500

Так как все исследования теоретические и проводились на компьютерах, то необходимо учесть затраты на электроэнергию. Примерное потребление одного компьютера за сутки – 180 Ватт, плюс монитор, еще 40 Ватт, т.е. 220 Ватт (или 0.22 кВт). Весь период работы составляет 176 дней или 4224.

Электроэнергетические затраты за время работы над проектом можно рассчитать, как

$$Q_э = W \cdot P \cdot t = 10779.65 \text{ руб.},$$

где W – тариф на электроэнергию (5,8 рублей за 1 кВт/ч), P – электроэнергетические затраты компьютера за весь период работы (2 компьютера – 0.44 кВт), t – время работы над проектом в часах.

Итого, электроэнергетические затраты на компьютеры составляют 10779.65 рублей за весь период исследовательской работы.

Основная заработная плата рассчитывается на основании отраслевой оплаты труда. Отраслевая система оплаты труда в ТПУ предполагает следующий состав заработной платы: оклад – определяется предприятием. В ТПУ оклады распределены в соответствии с занимаемыми должностями; стимулирующие выплаты – устанавливаются руководителем подразделений за эффективный труд и выполнение дополнительных обязанностей. В раздел включается основная заработная плата научных и

инженерно-технических работников непосредственно участвующих в выполнении работ. Величина расходов по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы окладов и тарифных ставок. В состав основной заработной платы включается премия, выплачиваемая 61 ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20 –30 % от тарифа или оклада. Расчет основной заработной платы $Z_{\text{осн}}$ представлен в таблице. Полная заработная плата включает в себя основную и дополнительную (12-20 % от $Z_{\text{осн}}$):

$$Z_{\text{зп}} = Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}. \quad (5.1)$$

Основная заработная плата рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_p, \quad (5.2)$$

где $Z_{\text{дн}}$ – среднедневная заработная плата, руб.; T_p – продолжительность работ, раб. дн.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{ок}} \cdot M}{F_d}, \quad (5.3)$$

где $Z_{\text{ок}}$ – месячный должностной оклад, руб.; M – количество месяцев работы без отпуска в течение года (при отпуске в 48 раб. дней $M = 10.4$ месяца, 6-дневная неделя); F_d – действительный годовой фонд рабочего времени (таблица 18).

Таблица 18 – Фонд рабочего времени

Показатель рабочего времени	Количество дней	
	Руководитель	Инженер
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней	72	118
Отпуск	56	24
Действительный годовой фонд рабочего времени	237	223

Руководитель – профессор

Месячный должностной оклад работника:

$$З_{\text{м}} = З_{\text{ок}} \cdot k_p, \quad (5.4)$$

где $З_{\text{ок}}$ – заработная плата по окладу, руб.; k_p – районный коэффициент (для Томска равен 1.3).

Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей учитывают величину предусмотренных Трудовым кодексом РФ доплат за отклонение от нормальных условий труда, а также выплат, связанных с обеспечением гарантий и компенсаций. Расчет дополнительной заработной платы ведется по следующей формуле:

$$З_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot З_{\text{осн}}, \quad (5.5)$$

где $k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной заработной платы (на стадии проектирования принимается равным 0.12 – 0.15). Расчет основной и дополнительной заработной платы приведён в таблице 19.

Таблица 19 – Расчет основной и дополнительной заработной платы

Участники	$З_{\text{ок}}$, руб	k_p	$З_{\text{м}}$, руб	$З_{\text{дн}}$, руб	T_p	$З_{\text{осн}}$, руб	$З_{\text{доп}}$, руб
Руководитель	42700.00	1.3	55510.00	2901.02	8	23208.16	2784.98
Инженер	9489.00	1.3	12335.70	587.41	168	98684.88	11842.18
Итого						121893.04	14626.18

Отчисления во внебюджетные фонды – обязательные отчисления по установленным законодательством Российской Федерации нормам органам государственного социального страхования, пенсионного фонда и медицинского страхования от затрат на оплату труда работников. Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется следующей формулой:

$$З_{\text{внб}} = k_{\text{внб}} (З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}), \quad (5.6)$$

де $k_{\text{внб}}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.). На 2014 г. в соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%. На основании

пункта 1 ст.58 закона №212-ФЗ для учреждений, осуществляющих образовательную и научную деятельность в 2014 году водится коэффициент – 0,271. Контрольные цифры отчислений во внебюджетные фонды представлены в таблице 9. Полный сформирование бюджет затрат научно-исследовательского проекта (таблица 20).

Таблица 20 – Отчисления во внебюджетные фонды

Участники	Сумма, руб
Руководитель	7044.14
Инженер	29952.83
Итого	36996.97

Накладные расходы учитывают прочие затраты организации: печать и ксерокопирование, оплата услуг связи, электроэнергии и т.д. Их величина определяется по формуле:

$$З_{\text{накл}} = k_{\text{нр}}(З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}), \quad (5.7)$$

где $k_{\text{нр}}$ – коэффициент, учитывающий накладные расходы (равен 0,16). Накладные расходы представлены в таблице 21.

Таблица 21– Накладные расходы

Участники	Сумма, руб
Руководитель	4158.90
Инженер	17684.32
Итого	21843.12

Таблица 22 – Расчет бюджета затрат

Наименование	Сумма, руб
Материальные затраты	57540.00
Затраты по основной заработной плате	121893.04
Затраты по дополнительной заработной плате	14626.18
Отчисления во внебюджетные фонды	36996.97
Затраты на электроэнергию	10779.65
Накладные расходы	21843.12
Бюджет затрат	263678.96

5.5. Расчет научно-технического эффекта

В последнее время для оценки научной ценности, технической значимости и эффективности планируемых и выполняемых госбюджетных и хоздоговорных работ, получил распространение метод бальных оценок. Бальная оценка заключается в том, что каждому фактору по принятой шкале присваивается определенное количество баллов. Обобщенную оценку проводят по сумме баллов по всем показателям или рассчитывают по формуле. На этой основе делается вывод о целесообразности НИОКР. Сущность этой методики состоит в том, что на основе оценок признаков работы определяется коэффициент научно-технического эффекта НИОКР по формуле:

$$H = \sum_{i=1}^3 k_i \cdot n_i, \quad (5.8)$$

где H – показатель НТУ, k – весовой коэффициент i -го признака НТУ, n – оценка i -го признака(в баллах).

Показатель НТУ равен 8.4 балла.

$$H = 0.6 \cdot 4 + 0.4 \cdot 6 + 0.2 \cdot (10 + 10) = 8.4$$

Оценка уровня проводится по следующей шкале:

1...4 балла - низкий НТУ
 5...7 баллов - средний НТУ
 8...10 баллов - сравнительно высокий НТУ
 11...14 баллов - высокий НТУ

По этой шкале НТУ приведенной научно-технической работы соответствует сравнительно высокому уровню.

Таблица 23 – Оценка НТУ НИОКР

Признак НТУ	Весовой коэфф.	Балл	Характеристика разработки	Выбранный балл	
Уровень новизны	0.6	8...10	Принципиально новая	4	
			Новая		
		5...7	Относительно новая		
		2...4	Не обладает новизной		
Теоретический уровень результатов	0.4	10	Установление закона	6	
		8	Глубокая разработка проблемы		
		6	Разработка способа (программы, устройства)		
			Элементарный анализ		
		2	Изложение опыта		
Возможность реализации	0.2	Время реализации			10
		10	В течение первых лет		
		4	От 5 до 10 лет		
		2	Свыше 10 лет		
		Масштаб реализации			10
		10	Народное хозяйство		
		4	Отрасль		
		2	Одно или несколько предприятий		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
ОБМ61	Кузнецов Алексей Валерьевич

Школа	ИШЯТ	Отделение	Экспериментальная физика
Уровень образования	Магистр	Направление/специальность	Физика

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

1. Работа посвящена разработке технологии высокоскоростного осаждения функциональных покрытий на поверхность материалов и изделий.
2. Описание рабочего места на предмет возникновения:
вредных проявлений факторов производственной среды
(метеоусловия, вредные вещества, освещение, шумы, вибрации, электромагнитные поля, ионизирующие излучения), опасных проявлений факторов производственной среды (механической природы, термического характера, электрической, пожарной и взрывной природы).
3. Промышленная санитария

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:
физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой;
химические, токсические (источники, действие фактора на организм человека требования охраны труда, оказание доврачебной помощи);
приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ);
электробезопасность (пороговые значения тока, правила, оказание первой доврачебной помощи);
пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, действия в аварийной ситуации)
приводится 1 из расчетов (расчет освещенности на рабочем месте, расчет потребного воздухообмена на рабочем месте, расчет необходимого времени эвакуации рабочего персонала);
2. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:
специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;
организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны
3. Чрезвычайные ситуации (ЧС)

Перечень графического материала:

- 1) План эвакуации
- 2) План размещения светильников на потолке

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ООД	Ю. М. Федорчук	Д.Т.Н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ61	А.В. Кузнецов		

6. Социальная ответственность

В современных условиях одним из основных направлений коренного улучшения всей профилактической работы по снижению производственного травматизма и профессиональной заболеваемости является повсеместное внедрение комплексной системы управления охраной труда, то есть путем объединения разрозненных мероприятий в единую систему целенаправленных действий на всех уровнях и стадиях производственного процесса.

Охрана труда – это система законодательных, социально-экономических, организационных, технологических, гигиенических и лечебно-профилактических мероприятий и средств, обеспечивающих безопасность, сохранение здоровья и работоспособности человека в процессе труда.

Опасным производственным фактором называется такой производственный фактор, воздействие которого в определенных условиях приводят к травме или другому внезапному, резкому ухудшению здоровья.

Вредным производственным фактором называется такой производственный фактор, воздействие которого на работающего, в определенных условиях, приводит к заболеванию или снижению трудоспособности.

6.1. Организация рабочего места

В данном разделе рассмотрены вопросы, связанные с организацией рабочего места в соответствии с нормами производственной санитарии, техники производственной безопасности и охраны окружающей среды.

Рациональная планировка рабочего места предусматривает четкий порядок и постоянство размещения предметов, средств труда и документации. То, что требуется для выполнения работ чаще должно

располагаться в зоне легкой досягаемости рабочего пространства.

При проектировании письменного стола должны быть учтены следующие требования. Высота рабочей поверхности стола рекомендуется в пределах 680-800 мм. Высота рабочей поверхности, на которую устанавливается клавиатура, должна быть 650 мм. Рабочий стол должен быть шириной не менее 700 мм и длиной не менее 1400 мм. Должно иметься пространство для ног высотой не менее 600 мм, шириной - не менее 500 мм, глубиной на уровне колен - не менее 450 мм и на уровне вытянутых ног - не менее 650 мм.

Рабочее кресло должно быть подъёмно-поворотным и регулируемым по высоте и углам наклона сиденья и спинки, а так же расстоянию спинки до переднего края сиденья. Рекомендуется высота сиденья над уровнем пола 420-550 мм. Конструкция рабочего кресла должна обеспечивать: ширину и глубину поверхности сиденья не менее 400 мм; поверхность сиденья с заглублённым передним краем.

Монитор должен быть расположен на уровне глаз оператора на расстоянии 500-600 мм. Согласно нормам угол наблюдения в горизонтальной плоскости должен быть не более 45 D к нормали экрана. Лучше если угол обзора будет составлять 30 D. Кроме того должна быть возможность выбирать уровень контрастности и яркости изображения на экране. Должна предусматриваться возможность регулирования экрана.

Экран и системные блоки производят электромагнитное излучение. Основная его часть происходит от системного блока и видеокабеля. Согласно [45] напряженность электромагнитного поля на расстоянии 50 см вокруг экрана по электрической составляющей должна быть не более:

- в диапазоне частот 5Гц-2кГц - 25В/м;
- в диапазоне частот 2кГц-400кГц - 2,5В/м.

Плотность магнитного потока должна быть не более:

- в диапазоне частот 5Гц-2кГц - 250нТл;

- в диапазоне частот 2кГц-400кГц - 25нТл.

Существуют следующие способы защиты от ЭМП:

- увеличение расстояния от источника (экран должен находиться на расстоянии не менее 50 см от пользователя);

- применение при экранных фильтров, специальных экранов и других средств индивидуальной защиты.

По нормам [46] конструкция ЭВМ должна обеспечивать мощность экспозиционной дозы рентгеновского излучения в любой точке на расстоянии 0,05м от экрана не более $7,7 \cdot 10^{-4}$ А/кг, что соответствует эквивалентной дозе, равной 100 мкР/час.

6.2. Условия безопасной работы

Главные параметры, которые характеризуют условия производство это – микроклимат, шум, вредные вещества, вибрация, электромагнитное излучение и освещенность.

Микроклимат. Микроклимат в производственных условиях определяется следующими параметрами:

- 1) температура воздуха;
- 2) относительная влажность воздуха;
- 3) скорость движения воздуха.

Оптимальные и допустимые значения характеристик микроклимата устанавливаются в соответствии со [47] и приведены в таблице 24.

Таблица 24 – Требования к микроклимату

Период года	Температура, °С		Отн. влажность, %		Скорость движения, м/с	
	Оптим.	Допуст.	Оптим.	Допуст.	Оптим.	Допуст.
Холодный	19-24		40-60	15-75	0,2	0,1-0,3
Теплый	15-28		40-60	15-75	0,3	0,2-0,4

Одними из основных мероприятий по оптимизации микроклимата и состава воздуха в производственных помещениях являются обеспечение надлежащего воздухообмена и отопления, тепловая изоляция нагретых поверхностей оборудования, воздухопроводов и гидротрубопроводов.

Шумовые загрязнения. При работе механических и электромеханических изделий часто возникают шумы. Шумы, возникающие при работе экспериментальной установки связаны с вращением движущихся частей форвакуумного насоса.

Для оценивания шумовой обстановки допускается использовать числовую характеристику, называемую уровнем звука (измеряется в дБ).

В соответствии с ГОСТ 12.1.029-80 допустимый уровень шума при работе, требующей сосредоточенности, работе с повышенными требованиями к процессам наблюдения и дистанционного управления производственными циклами на рабочих местах в помещениях лабораторий с шумным оборудованием, составляет 75 дБ. Зоны с уровнем звука 80 дБ должны быть обозначены знаками безопасности согласно ГОСТ 12.4.026-76.

Снижение шума, воздействующего на человека на рабочих местах до значений, не превышающих допустимые, достигается применением средств и методов коллективной защиты, применением средств индивидуальной защиты.

Согласно ГОСТ 12.1.003-83 в качестве средств коллективной защиты применяются следующие методы:

1. изменение направленности излучения шума. Установка должна быть сориентирована так, чтобы максимум излучательного шума был направлен в противоположную сторону от рабочего места;

2. рациональная планировка помещения позволяет увеличить расстояние до источника шума и уменьшить его воздействие на человека. Шумные помещения должны располагаться таким образом, чтобы их разделяло несколько других помещений или ограждение с хорошей звукоизоляцией;

3. акустическая обработка помещения. Подразумевает облицовку части внутренних ограждающих поверхностей звукопоглощающими материалами или размещение штучных поглотителей (свободно подвешенных объемных тел различной формы);

4. применение звукоизоляции. Звукоизоляция достигается созданием герметичной преграды на пути распространения воздушного шума в виде стен, экранов, кожухов, кабин.

Работающих в шумоопасных зонах, администрация снабжает средствами индивидуальной защиты, которыми являются специальные наушники, вкладыши в ушную раковину, противошумовые каски, защитное действие которых основано на изоляции и поглощения звука.

Для определения допустимого уровня шума на рабочих местах используется ГОСТ 12.1.003-83. ССБТ «Шум. Общие требования безопасности», СН 2.2.4/2.1.8.562-96 «Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки». Согласно ГОСТ 12.1.003 – 83, нормируемой шумовой характеристикой рабочих мест при шуме являются уровни звуковых давлений в децибелах в октановых полосах. В таблице 25 приведены допустимые уровни звукового давления на рабочем месте.

Таблица 25 – Допустимые уровни звукового давления на рабочем месте

Вид деятельности	Частота, Гц							
	Уровень звукового давления, дБ							
	62	125	250	500	1000	2000	4000	8000
Научная деятельность, проектирование	71	61	54	49	45	42	40	38

Материалы для экранов:

Звукоотражающие экраны – обычно выполнены из однослойных материалов: кирпича, акриловых и пластиковых панелей, стекла и др. Они имеют низкий уровень поглощения звука (коэффициент - 0,01 – 0,04), однако отличаются высокой эстетичностью и простотой монтажа.

Звукопоглощающие экраны – изготовлены многослойных металлических панелей, заполненных специальными звукопоглощающими материалами. Коэффициент поглощения находится в пределах от 0,6 до 1.

Комбинированные экраны – выполнены из металлических многослойных и прозрачных пластиковых панелей. Обеспечивают высокий уровень звукопоглощения, эстетичность и хороший обзор. Отражающие свойства этих экранов определяются коэффициентом звукопоглощения равным от 0,01 до 0,04 - они менее эффективны, в сравнении с экранами смонтированными из звукопоглощающих материалов.

В нашей научно-исследовательской лаборатории не находится никаких приборов и устройств, создающих шум, который может оказать влияние на здоровье. Так же в помещении отсутствует вентиляционная система, которая могла бы создавать дополнительные шумы. Лаборатория расположена среди учебных комнат, что означает, что в соседних комнатах так же отсутствует производственное оборудование.

Освещенность. Утомляемость органов зрения может быть связана как с недостаточной освещенностью, так и с чрезмерной освещенностью, а также с неправильным направлением света.

Естественное освещение составляет 3%, совместное 1,8 %, искусственное 200 лк (освещенность при комбинированном освещении от общего). Освещение комбинированное.

Расчёт общего равномерного искусственного освещения горизонтальной рабочей поверхности выполняется методом коэффициента светового потока, учитывающим световой поток, отражённый от потолка и стен. Длина помещения $A = 5300$ мм, ширина $B = 4700$ мм, высота = 3500 мм. Высота рабочей поверхности над полом $h_p = 800$ мм. Согласно СНиП 23-05-95 необходимо создать освещенность не ниже 150 лк, в соответствии с разрядом зрительной работы.

Площадь помещения:

$$S = A \cdot B = 24,91 \text{ см}^2,$$

где A – длина, м,

B – ширина, м.

Коэффициент отражения свежепобеленных стен с окнами, без штор $\rho_c = 50\%$, свежепобеленного потолка $\rho_{\Pi} = 70\%$. Коэффициент запаса, учитывающий загрязнение светильника, для помещений с малым выделением пыли равен $K_z = 1,5$. Коэффициент неравномерности для люминесцентных ламп $Z = 1,1$. Выбираем лампу дневного света ЛД, световой поток которой равен 2300 Лм.

Светильники с люминесцентными лампами типа ОДОР-2-40. Этот светильник имеет две лампы мощностью 40 Вт каждая, длина светильника равна 1227 мм, ширина – 265 мм.

Интегральным критерием оптимальности расположения светильников является величина λ , которая для люминесцентных светильников с защитной решёткой лежит в диапазоне 1,1–1,3. Принимаем $\lambda = 1,1$, расстояние светильников от перекрытия (свес) $h_c = 300$ мм.

Высота светильника над рабочей поверхностью определяется по формуле:

$$h = H - h_p = 2400 \text{ м.}$$

Расстояние между соседними светильниками или рядами определяется по формуле:

$$L = \lambda \cdot h = 1708 \text{ мм.}$$

Число рядов светильников в помещении:

$$N_b = \frac{B}{L} \approx 2.$$

Число светильников в ряду:

$$N_a = \frac{A}{L} \approx 2.$$

Однако помещение близко к квадратной форме, поэтому разумно добавить дополнительный светильник в середине помещения. Таким образом светильники будут расположены в шахматном порядке общее количество светильников будет равно $N = 5$.

Расстояние от крайних светильников или рядов до стены определяется по формуле:

$$l = \frac{L}{3} = 570 \text{ мм.}$$

На рисунке 1 изображен план помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами.

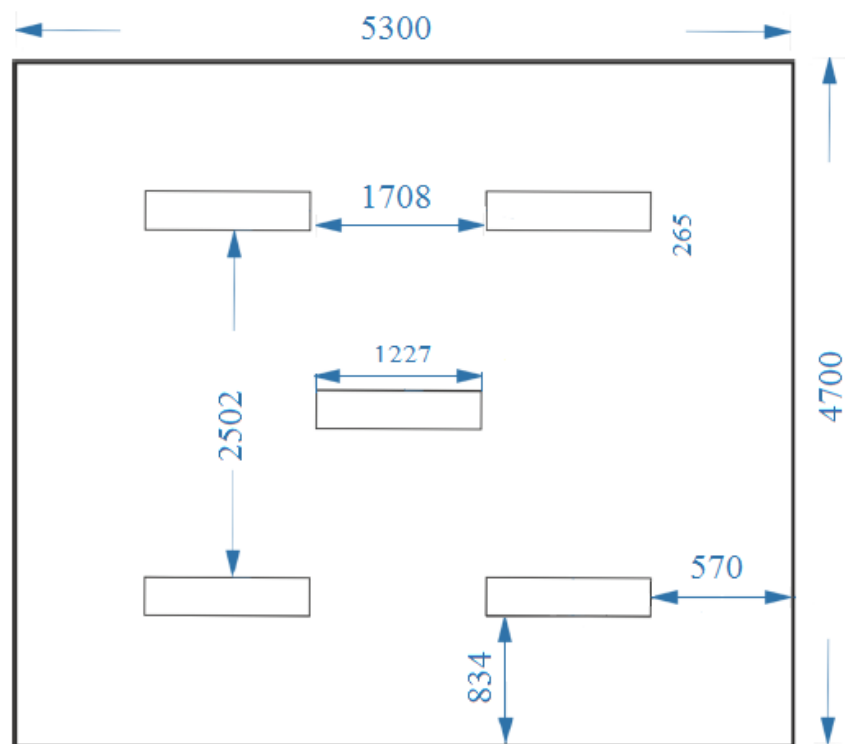


Рисунок 15 – План помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами

Индекс помещения определяется по формуле:

$$i = \frac{A \cdot B}{h(A + B)} = 1,04.$$

Коэффициент использования светового потока, показывающий какая часть светового потока ламп попадает на рабочую поверхность, для светильников типа ОДОР с люминесцентными лампами при $\rho_c = 50\%$, $\rho_{\text{П}} = 70\%$ и индексе помещения $i = 10$ равен $\eta = 0,42$.

Потребный световой поток группы люминесцентных ламп светильника определяется по формуле:

$$\Phi_n = \frac{E \cdot A \cdot B \cdot K_3 \cdot Z}{N \cdot \eta},$$

$$\Phi_n = \frac{200 \cdot 5,3 \cdot 4,7 \cdot 1,5 \cdot 1,1}{10 \cdot 0,42} = 1957 \text{ лм.}$$

Делаем проверку выполнения условия:

$$\begin{aligned}
-10\% &\leq \frac{\Phi_{\text{ЛД}} - \Phi_{\text{Р}}}{\Phi_{\text{Р}}} \cdot 100\% \leq 20\%, \\
-\frac{2300 - 1957}{1957} \cdot 100\% &= 17,5 < 20\%, \\
\frac{\Phi_{\text{ЛД}} - \Phi_{\text{Р}}}{\Phi_{\text{Р}}} \cdot 100\% &= 17,5\%.
\end{aligned}$$

Таким образом необходимый световой поток светильника не выходит за пределы требуемого диапазона.

Электромагнитные поля. В установке используются магнетронные генераторы при помощи которых происходит подвод СВЧ-энергии к различным частям установки. Таким образом, при организации безопасности труда, необходимо учитывать воздействие электромагнитных полей сверхвысоких частот на организм человека.

Эффект воздействия СВЧ электромагнитного поля на биологические объекты в известной степени определяется количеством проникающей в них и поглощаемой ими электромагнитной энергии. Значительная часть энергии микроволн поглощается тканями организма и превращается в тепло, что объясняют возникновением колебания ионов и дипольных молекул воды, содержащихся в тканях. Наиболее эффективное поглощение микроволн отмечается в тканях с большим содержанием воды: кровь, тканевая жидкость, слизистая желудка, кишок, хрусталик глаза и др. Нагрев тканей в СВЧ-поле является наиболее простым и очевидным эффектом действия микроволн на организм человека. Положение максимума температуры, его удаление от поверхности тела зависит от проводимости среды, а, следовательно, и от частоты радиоволны, действующей на ткань: с увеличением частоты (укорочением волны) максимум температуры приближается к поверхности.

Длительное и систематическое воздействие на организм СВЧ-излучения вызывает повышенную утомляемость, периодически

появляющуюся головную боль, сонливость или нарушение сна, повышение артериального давления и боли в области сердца.

В России система стандартов по электромагнитной безопасности складывается из ГОСТ и СанПиН. Предельно допустимые значения плотности потока энергии электромагнитного поля составляют – 10 мкВт/см² в течение 8 часов, 10-100 мкВт/см² в течение 2 часов и > 100 мкВт/см² не более 20 минут.

К средствам коллективной защиты обслуживающего персонала относятся стационарные экраны (различные заземленные металлические конструкции – щитки, козырьки, навесы сплошные или сетчатые, системы тросов) и съемные экраны.

В качестве средств индивидуальной защиты от электромагнитных полей промышленной частоты служат индивидуальные экранирующие комплекты (очки, имеющие стекла, отражающие электромагнитные излучения и фартуки, халаты, выполненные из металлизированной хлопчатобумажной ткани).

В основном из средств защиты предлагаются защитные фильтры для экранов мониторов. Они используются для ограничения действия на пользователя вредных факторов со стороны экрана монитора, улучшает эргономические параметры экрана монитора и снижает излучение монитора в направлении пользователя. Представленные на рынке защитные фильтры для экранов мониторов по назначению делятся на 2 основные группы:

1. защитные фильтры улучшающие эргономические параметры дисплея и ослабляющие инфракрасное, ультрафиолетовое излучения, но не влияющие на электромагнитные параметры;

2. защитные фильтры улучшающие эргономические параметры дисплея, ослабляющие инфракрасное, ультрафиолетовое излучения, ослабляющие электростатическое поле и переменное электрическое поле.

Допустимые уровни облучения (по ОСТ 54 30013-83):

В диапазоне СВЧ = 300...300000 МГц допустимая плотность потока мощности (ППМ_{доп}) при времени облучения (τ облуч.) в течение всего рабочего дня составляет 10 мкВт/см², при τ облуч., равном 2 ч, - 100 мкВт/см² и при τ облуч, равном 15...20 мин, - 1000 мкВт/см² (при обязательном использовании защитных очков). В остальное рабочее время интенсивность облучения не должна превышать 10 мкВт/см². Для лиц, профессионально не связанных с облучением, и для населения в целом ППМ не должен превышать 1 мкВт/см².

Защита человека от опасного воздействия электромагнитного излучения осуществляется следующими способами:

Один из наиболее эффективных способов защиты от негативного воздействия электромагнитного излучения является применение специальных приборов, которые позволяют нейтрализовать данное излучение и максимально минимизировать его негативное воздействие на организм человека. Принцип действия данных приборов основан на наведении противо-ЭДС, которая способствует снижению негативного воздействия на организм человека нежелательных электромагнитных излучений.

Максимальное сокращение времени пребывания в зоне действия электромагнитного излучения является одним из наиболее эффективных способов защиты организма от негативного воздействия электромагнитного излучения. Особенно актуален данный вопрос для работников электроэнергетических предприятий, где уровень электромагнитного излучения максимальный.

Электробезопасность. Опасность поражения электрическим током зависит от таких факторов, как сырость, жара, едкие пары и газы, токопроводящая пыль. При наличие данных факторов возникает возможность перехода напряжения на нетоковедущие части электрооборудования (корпуса, станины, кожухи), с которыми работающий

находится в контакте. В таких условиях также понижается электрическое сопротивление тела человека, дополнительно увеличивая опасность поражения током.

Действующими правилами устройства электроустановок (ПУЭ) все помещения подразделены на следующие три класса:

1. Помещения без повышенной опасности: сухие, с нормальной температурой воздуха, с токонепроводящими полами. В помещениях без повышенной опасности напряжение до 1000 В может применяться для всех стационарно установленных осветительных приборов вне зависимости от высоты их установки.

2. Помещения с повышенной опасностью: сырые с относительной влажностью воздуха (длительной) более 75%; жаркие с температурой воздуха, длительно превышающей $+30^{\circ}\text{C}$; с полами из токопроводящих материалов; с большим количеством выделяющейся токопроводящей технологической пыли, оседающей на проводах и проникающей внутрь электроустановок; с размещением электроустановок с металлическими корпусами, имеющих соединение с землей, металлоконструкций зданий и технологического оборудования, допускающих одновременное соприкосновение с ними. В помещениях с повышенной опасностью предельное напряжение до 1000 В.

3. Помещения особо опасные: особо сырые с относительной влажностью воздуха, близкой к 100%, химически активной средой, одновременным наличием двух и более условий, свойственных помещениям с повышенной опасностью. В помещениях особо опасных напряжение свыше 1000 В или до 1000 В, но с двумя опасными факторами – сырость, температура.

В связи с наличием электроустановок с металлическим корпусом, связанным с землей данное лабораторное помещение классифицируется категорией II – повышенной опасности.

Использование высокого напряжения блока питания разряда (до 1 кВ, ток до 5 А) и напряжения сети 380\220 В, которое необходимо для питания электродвигателей форвакуумных насосов, электрических измерительных систем и других элементов установки, может привести к поражению электрическим током. Источником поражения электрическим током могут быть незащищенные и неизолированные электропровода, поврежденные электродвигатели, открытые коммутаторы, не заземленное оборудование и др. Проходя через живые ткани, электрический ток оказывает термическое, электролитическое и биологическое воздействия. Это приводит к различным нарушениям в организме, вызывая как местное поражение тканей и органов, так и общее поражение организма [34, 35]. Самый опасный – переменный ток частотой 50–60 Гц.

В соответствии с инструкцией №22 по охране труда при работе с электроустановками лаборатории №23 НИИ ЯФ, ПУЭ для обеспечения электробезопасности обслуживающего персонала необходимо предусмотреть:

1. защитное заземление (преднамеренное электрическое соединение с землей или ее эквивалентом металлических нетоковедущих частей, которые могут оказаться под напряжением) всех металлических нетоковедущих частей электрооборудования $R_3 < 4 \text{ Ом}$;
2. раздельное размещение аппаратуры с напряжением до 1000 В и выше 1000 В;
3. Использование зануления (преднамеренного электрического соединения с нулевым защитным проводником металлических нетоковедущих частей, которые могут оказаться под напряжением).
4. ограждение электронного источника, исключающее возможность прикосновения к токоведущим частям;
5. полное ограждение от прикосновения к аппаратуре с напряжением выше 1000 В;

6. отключение всех источников питания установки общим рубильником;

7. использование предупредительных табличек.

В качестве средств индивидуальной защиты для электроустановок до 1 кВ применяются как основные средства защиты:

1. изолирующие штанги;
2. изолирующие и электроизмерительные клещи, указатели напряжения;
3. диэлектрические перчатки или изолированный инструмент.

В качестве дополнительных средств защиты применяются:

1. диэлектрические галоши;
2. диэлектрические ковры;
3. изолирующие подставки и накладки;
4. изолирующие колпаки.

Недоступность токоведущих частей для случайного прикосновения обеспечивается следующими способами: ограждением и расположением токоведущих частей на недостижимой высоте или в недоступном месте, рабочая изоляция. Ограждения в виде корпусов, кожухов, оград выполняются сплошными и ли сетчатыми. Для доступа непосредственно к электрооборудованию или токоведущим частям последнего (при осмотре или ремонте) в ограждениях предусматриваются открывающиеся части: крышки, дверцы, двери и т.д. Эти части закрываются специальными запорами или снабжаются блокировками.

6.3. Профилактические меры при природных и техногенных ЧС

Рассмотрим такую природную чрезвычайную ситуацию, как сильный мороз, которая очень актуальна в нашем регионе.

Лаборатория расположена в городе Томск с континентально-циклоническим климатом и природные явления (землетрясения, наводнения, засухи, ураганы и т. д.), в данном городе отсутствуют.

Возможными ЧС на объекте в данном случае, могут быть сильные морозы и диверсия.

Для Сибири в зимнее время года характерны морозы и метели. В результате порывов ветра могут быть обрывы линий электропитания, из-за чего возможны перебои в электроснабжении; перегрузки, которые могут стать причиной пожара. Для предотвращения подобных ситуаций необходима организация системы аварийного электропитания, по возможности проведение линии электроснабжения под землей. Низкие температуры могут привести к авариям систем теплоснабжения. В случае переморозки труб должны быть предусмотрены запасные обогреватели. Их количества и мощности должно хватать для того, чтобы работа на производстве не прекратилась.

В последнее время, в связи с внешней политикой страны, возможны проявления диверсии. Угрозы могут быть как ложными, так и действительными, поэтому необходимы меры предосторожности по этому поводу. В качестве мер безопасности могут быть приняты следующие действия— установка системы: видеонаблюдения и круглосуточной охраны, сохранение конфиденциальной информации о охранной системе. Необходимо так же проводить информирование должностных лиц и тренировки по отработке действий на случай экстренной эвакуации.

Так же возможна такая техногенная чрезвычайная ситуация как диверсия.

Диверсия — совершение взрыва, поджога или иных действий, направленных на разрушение или повреждение предприятий, сооружений, путей и средств сообщения, средств связи, объектов жизнеобеспечения

населения в целях подрыва экономической безопасности и обороноспособности Российской Федерации. (ч.1 ст. 281 УК РФ).

Меры безопасности при угрозе проведения террористических актов:

1. Следует действовать в соответствии с рекомендациями, полученными по системе оповещения.

2. Быть предельно внимательным к окружающим подозрительным предметам. Не прикасаться к ним. О данных предметах следует сообщить компетентным органам.

3. При обнаружении подозрительного предмета в подъезде своего дома или на придомовой территории – следует опросить соседей, возможно, он принадлежит им. Если владелец не установлен - немедленно сообщить о находке в отделение полиции.

Для предотвращения диверсии на предприятиях введен пропускной режим совместно с системой видеонаблюдения. Так же некоторые объекты ограждены.

Во всех перечисленных случаях:

1. не следует трогать, вскрывать и передвигать найденный предмет;

2. следует зафиксировать время обнаружения находки;

3. постараться сделать так, чтобы люди отошли как можно дальше от опасной находки;

4. обязательно дождаться прибытия оперативно-следственной группы.

Следует помнить: внешний вид предмета может скрывать его настоящее назначение. В качестве камуфляжа для взрывных устройств используются обычные бытовые предметы; сумки, пакеты, свертки, коробки, игрушки и т.п.

6.4. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой производственной среды

Электробезопасность. В зависимости от условий в помещении опасность поражения человека электрическим током увеличивается или уменьшается. Не следует работать с ЭВМ в условиях повышенной влажности (относительная влажность воздуха длительно превышает 75%), высокой температуры (более 35°C), наличии токопроводящей пыли, токопроводящих полов и возможности одновременного прикосновения к имеющим соединение с землёй металлическим элементам и металлическим корпусом электрооборудования. Оператор ЭВМ работает с электроприборами: компьютером (дисплей, системный блок и т.д.). Существует опасность электропоражения в следующих случаях:

- при прикосновении к нетоковедущим частям, оказавшимся под напряжением (в случае нарушения изоляции токоведущих частей ЭВМ);
- при прикосновении с полом, стенами, оказавшимися под напряжением;
- при коротком замыкании в высоковольтных блоках: блоке питания и блоке дисплейной развёртки.

Отключение напряжения с токоведущих частей, на которых или вблизи которых будет проводиться работа, и принятие мер по обеспечению невозможности подачи напряжения к месту работы, вывешивание плакатов, указывающих место работы, заземление корпусов всех установок через нулевой провод, покрытие металлических поверхностей инструментов надёжной изоляцией, недоступность токоведущих частей аппаратуры (заключение в корпуса электропоражающих элементов, заключение в корпус токоведущих частей).

Опасность поражения электрическим током при прикосновении к корпусу и другим металлическим частям оборудования, оказавшимися под напряжением вследствие замыкания на корпусе и по другим причинам,

может быть устранена быстрым отключением повреждённой установки от питающей сети и вместе с тем снижением напряжения корпуса относительно земли.

Пожарная и взрывная безопасность. Пожарная безопасность в данном технологическом процессе обеспечивается соблюдением норм. В связи с этим рабочее помещение оснащается средствами пожаротушения. В специально отведённых местах устанавливаются: огнетушители, щит с ломом, лопатами, топорами.

Одним из важных условий успешной ликвидации возникшего пожара является быстрое обнаружение загорания и немедленное сообщение об этом местной пожарной охране. Для сообщения о пожаре в рабочих помещениях служит специальная пожарная сигнализация. Пожар, т.е. процесс горения, можно устранить путём прекращения доступа воздуха к горящему предмету или снижение его температуры горения. В средствах тушения пожара используют два метода одновременно.

Противопожарное водоснабжение обеспечивается устройством специального водопровода. При необходимости допускается водоснабжение из водоёмов и резервуаров. При водоснабжении из водопровода, пожарные рукава присоединяются к гидрантам, которые должны устраиваться на расстоянии не более 100 метров от рабочих помещений.

Среди автоматических средств пожаротушения на производственных предприятиях наиболее распространены спринклерные и дренчерные установки. Они представляют собой разветвлённую распределительную водопроводную сеть с распылителями водяных струй или воздушно-механической пены при помощи спринклерных или дренчерных головок. Спринклерная распылительная головка представляет собой блок с отверстием, закрытым стеклянным колпаком (клапаном), удерживаемым замком, изготовленным из легкоплавкого металлического

сплава. При повышении температуры воздуха, нагретого пламенем начавшегося пожара, вследствие расплавления сплава замок расплавляется и освобождает клапан, через который вода, попадая на розетку, распыляется и орошает горящее вещество. Применяют сплав замка с температурой плавления 72 °С, 93 °С, 141 °С, 182 °С, в зависимости от условий возможного загорания. Одновременно с помощью контрольно-сигнального аппарата подаётся звуковой сигнал, возвещающий о пожаре.

Дренчерные установки группового действия также состоят из разветвлённых трубопроводов, оборудованных дренчерными распылительными головками, но без замков, с открытыми отверстиями для выхода воды. Выход воды закрыт клапаном группового действия. Пуск воды для тушения пожара может осуществляться вручную или автоматически.

Автоматическая установка пожаротушения содержит:

- 1) источник водоснабжения (бассейн, водоём);
- 2) водопитатели (резервуары, постоянно наполненные водой);
- 3) контрольно-сигнальное устройство, контролирующее готовность установки к работе, включающее её и подающее сигнал пожарной тревоги;
- 4) сеть питательных и распределительных трубопроводов к приборам-оросителям, подающих распылительную воду к очагу пожара.

Автоматическое включение установки в работу осуществляется от датчиков, реагирующих на факторы пожара (тепло, свет, дым). Помимо основного, установка оборудована вспомогательным водопитателем, обеспечивающим постоянное давление воды в системе.

Контрольно-пусковой узел предназначен для включения подачи воды в установку, автоматическое приведение в действие звуковых и световых сигналов о начавшемся пожаре.

При возникновении аварийной ситуации необходимо:

1. Сообщить руководству (дежурному).
2. Позвонить в соответствующую аварийную службу или МЧС.
3. Принять меры по ликвидации аварии в соответствии с инструкцией.

План эвакуации из лаборатории представлен на рисунке 15.

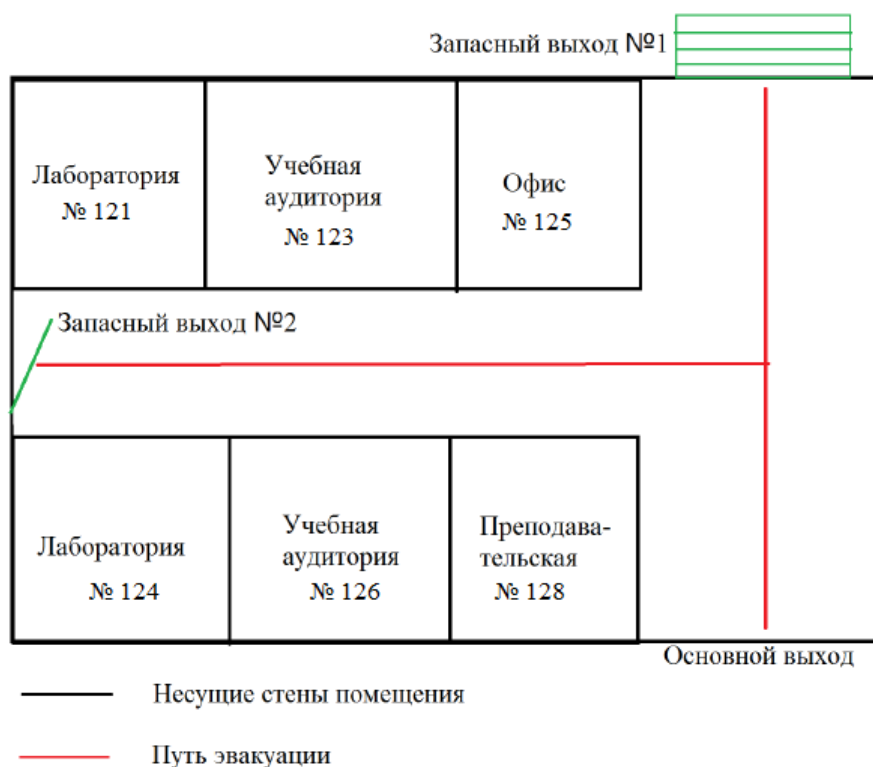


Рисунок 15 – План эвакуации

Пожарная безопасность обеспечивается наличием огнетушителей:

1. Углекислотные огнетушители (ОУ-2). Углекислотные огнетушители предназначены для тушения загораний веществ, горение которых не может происходить без доступа воздуха, загораний электроустановок, находящихся под напряжением не более 1000В. Рекомендуется периодически проверять массу заряда - не реже одного раза в два года. Преимуществом Углекислотных огнетушителей, является то, что они не оставляют следов тушения, т.к. двуокись углерода полностью

испаряется. Эта особенность огнетушителей углекислотных не портит при тушении электронное оборудование, приборы и механизмы, а также и само охраняемое помещение и определяет их специфику использования.

2. Огнетушитель воздушно-пенный ОВП-10 (А и В): Первичные средства пожаротушения. Огнетушитель воздушно-пенный предназначен для тушения возгораний твердых, тлеющих материалов органического происхождения (дерево, бумага, уголь и т.д.) – класс пожара А и жидкостей или твердых тел, превращающихся в жидкости (нефтепродукты, масла, краски и т.п.) – класс пожара В. Основным достоинством огнетушителей воздушно-пенных является продолжительное время работы, превышающее время работы других типов огнетушителей. По истечении 1 года хранения водные растворы зарядов выборочно должны проверяться на кратность пенообразования.

3. Порошковые огнетушители (ОП-2): Огнетушители ОВП обеспечивают подачу воздушно-механической пены. Огнетушащий состав – раствор пенообразователя. Порошковые огнетушители используются в качестве первичного средства тушения загорания пожаров класса А (твердых веществ), В (жидких веществ), С (газообразных веществ) и электроустановок, находящихся под напряжением до 1000 В. Огнетушители не предназначены для тушения загораний щелочных и щелочноземельных металлов и других материалов, горение которых может происходить без доступа воздуха. Перезарядка – один раз в год. Применение для тушения электроустановок, находящихся под напряжением не допускается.

Источником пожаровзрывоопасности в лаборатории может быть любой электроприбор. Во время работы с электроприбором не исключены оплавления изоляционных проводов, что может стать причиной короткого замыкания, перегрузки электронной схемы, которая, перегреваясь, сгорает с испусканием искр.

Пожарную опасность помещений подразделяют на А, Б, В, Г, Д категории. Нашу лабораторию в соответствии с НПБ 105-03 можно отнести к В категории, т.к. в помещении присутствуют деревянные столы, оконные рамы.

6.5. Особенности законодательного регулирования проектных решений

По данной теме рассматриваются законодательные и нормативные документы:

Опасность поражения электрическим током:

1. Инструкция №2-14 по охране труда при работе с электрооборудованием напряжением до 1000 В;
2. ГОСТ 12.1.038-82 Электробезопасность. Предельно допустимые значения напряжений прикосновения и токов.
3. ГОСТ 12.1.045-84 Электростатические поля. Допустимые уровни на рабочих местах и требования к проведению контроля.

1. Опасность действия высокой температуры:

1. ГОСТ 12.2.007.0-75 Изделия электротехнические. Общие требования безопасности.
2. ГОСТ 30331.4-95 Часть 4. Требования по обеспечению безопасности. Защита от тепловых воздействий.
3. ГОСТ Р ИСО 6942-2007 Одежда для защиты от тепла и огня. Методы оценки материалов и пакетов материалов, подвергаемых воздействию источника теплового излучения.

Опасность поражения химическими веществами:

1. ГОСТ Р ИСО 17491-4-2009 Одежда специальная для защиты от химических веществ.
2. ГОСТ 12.0.004-90 ССБТ Организация обучения безопасности труда. Общие положения.

Опасность при работе с газовыми баллонами:

1. инструкция №2-07 по охране труда при работе с баллонами, работающими под давлением.

2. ГОСТ Р ИСО 11439-2010 Газовые баллоны. Баллоны высокого давления для хранения природного газа. Технические условия.

3. ГОСТ Р 51982-2002 Регуляторы давления для газовых аппаратов с давлением на входе до 20 кПа. Общие технические требования и методы испытаний.

Микроклимат:

1. ГОСТ 30494-96 Здания жилые и общественные помещения. Параметры микроклимата в помещении.

2. ГОСТ 12.1.005 Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны.

3. СНиП 21-01-97 от 1998-01-01 Пожарная безопасность зданий и сооружений.

При введении в эксплуатацию нового оборудования сотрудники, которые будут работать на нем, должны пройти внеплановый инструктаж по правилам эксплуатации и безопасной работе на данном оборудовании.

Список литературы

1. Wagener R., Caldwell J., Owen T., Kim S.J., et al. // *Icarus*. – 1985. – V. 63. – P. 222-236.
2. Bezard B., Moses J.L., Lacy J., Greathouse T., et al. // *Bull. Am. Astr. Soc.* – 2001. – P. 33.
3. Romani P.N, Jennings D.E., Bjoraker G.L., et al. // *NASA Tech. Rep. Serv.* – 2008.
4. Hesman B., Bjoraker G.L., Sada P., et al. // *Astron. Astrophys.* – 2012. P. 760.
5. Coustenis A., Achterberg R.K., Conrath B.J., et al. // *Icarus*. – 2007. – 189. – P. 35-62.
6. Kunde V.J. Aikin A.C., Hanel R.A., et al. // *Nature*. – 1981. – V. 292. – P. 686-8.
7. Coustenis A., Salama A., Schulz B., et al. // *Icarus*. – 2003. – V. 161. – P. 383-403.
8. Hollas J., *Basic Atomic and Molecular Spectroscopy*. Wiley-Interscience, New York, 2002.
9. Давыдов А.С. Квантовая механика. М.: Наука, 1975. 703 с.
10. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. 5-е изд. М.: Наука, 1976. 664 с.
11. Улеников О.Н., Макушкин Ю.С. Частичная диагонализация при решении электронно-ядерной задачи в молекулах // *Изв. Вузов СССР. Физика*. 1975. №8. 54-59 с.
12. Шифф Л. Квантовая механика: Пер. с англ. М.: ИЛ, 1975. 475 с.
13. Макушкин Ю.С., Улеников О.Н., Чеглоков А. Е. Симметрия и ее применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул, часть 2. – Томск: Изд-во ТГУ, 1990. – 222 с.
14. F. Hegelund and F. M. Nicolaisen, *Journal of Molecular Spectroscopy*, vol. 128, no. 2, pp. 321– 333, 1988.

15. F. Hegelund, *Journal of Molecular Spectroscopy*, vol. 126, no. 1, pp. 32 – 57, 1987.
16. D. Papoushek, M.R. Aliev, *Molecular Vibrational Rotational Spectra*. – Prague: Academia, 1982.
17. O.N. Ulenikov, Yu.S. Makushkin // *J. Mol. Spectrsc.* – 1977. – V. 68. – P. 1-20.
18. O.N. Ulenikov, R.N. Tolchenov // *Spectrochim. Acta A.* – 1996. – V. 52. – P. 1829-2231.
19. O.N. Ulenikov, Bekhtereva E.S., Albert S., et al. // *J. Phys. Chem. A.* – 2009. V. – 113. – P. 2218-2231.
20. F.W. Loomis Absorption Spectrum of HCl. – *Astrophys. J.*, 1920, v. 52, №3, p. 248-250.
21. A.S. King, R.T. Birge On the spectrum of ^{13}CO . – *Astrophys. J.*, 1930, v. 72, № 4, p. 251-252.
22. Y.S. Makushkin, O.N. Ulenikov Isotopic relations for polyatomic molecules. *Opt. Spectrosc.* 1975; 39. 629–36.
23. A.D. Bykov, Y.S. Makushkin, O.N. Ulenikov On isotope effects in polyatomic molecules: some comments on the method. *J. Mol. Spectrosc.* 1981; 85: 462–79.
24. A.D. Bykov, Yu.S. Makushkin, O.N. Ulenikov On the displacements of centers of vibration-rotation bands under isotope substitution in polyatomic molecules. *J. Mol. Spectrosc.* 1982; 93:46
25. A.D. Bykov, Yu.S. Makushkin, O.N. Ulenikov, On the displacements of centers of vibration-rotation lines under isotope substitution in polyatomic molecules. *Mol. Phys.* 1984; 51:907–18.
26. Yu.S. Makushkin, O.N. Ulenikov On the transformation of the complete electron-nuclear Hamiltonian of a polyatomic molecule to the intramolecular coordinates. *J. Mol. Spectrosc.* 1977; 68:1–20.

27. Rothman L.S., Barbe A., Benner D.C., Brown L.R., Camy-Peyret C., Carleer M., et al. The HITRAN molecular spectroscopic database: edition of 2000 including updates through 2001 // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf., 2003. – V. 82. – pp. 5 – 44.
28. Rothman L.S., Gordon I.E., Babikov Y., Barbe A., Benner D.C., Bernath P.F., et al. The HITRAN 2012 molecular spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. – 2013 – V. 130. – pp. 4 – 50.
29. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Aslapovskaya Yu.S., Horneman V-M. High resolution spectroscopic study of C₂H₄: re-analysis of the ground state and ν_4 , ν_{10} and ν_{12} vibrational bands // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. – 2013. – V. 118. - pp. 14 – 25.
30. Auwera J., Fayt A., Tudorie M., Rotger M., Boudon V., Franco B., Mahieu E. Self-broadening coefficients and improved line intensities for the ν_7 band of ethylene near 10:5 μm , and impact on ethylene retrievals from Jungfraujoch solar spectra // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. – 2014. – V. 148. – pp. 177 – 85.
31. O.N. Ulenikov, Olga V. Gromova, Elena S. Bekhtereva, Maul Christof, Sigurd Bauerecker, M. G. Gabona, Augustine Tuck L. Tan, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 151, 224 (2015).
32. O.N. Ulenikov, Olga V. Gromova, Elena S. Bekhtereva, Nadezhda V. Kashirina, Maul Christof, Sigurd Bauerecker, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 164, 117 (2015).
33. O. N. Ulenikov, Olga V. Gromova, Elena S. Bekhtereva, Nadezhda V. Kashirina, Galina A. Onopenko, Sigurd Bauerecker, Christof Maul, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 317, 32 (2015).
34. Oleg N. Ulenikov, Olga V. Gromova, Elena S. Bekhtereva, Yuliya S. Aslapovskaya, Tuck L. Tan, Christian Sydow, Christof Maul, Sigurd Bauerecker, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 187, 403 (2017).

35. Coustenis A., Salama A., Schulz B., et al. // *Icarus*. – 2003. – V. 161. – P. 383-403.
36. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., et al. // *J. Quant. Spectrosc. Rad. Trans.* – 2015. – V. 151. – P. 224- 238.
37. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., et al. // *J. Quant. Spectrosc. Rad. Trans.* – 2015. – V. 164. – P. 117-128.
38. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., et al. // *J. Quant. Spectrosc. Rad. Trans.* – 2015. – V. 317. – P. 32-40.
39. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., et al. // *J. Quant. Spectrosc. Rad. Trans.* – 2017. – V. 187. – P. 403-413.
40. Tann T.L., Kang L.L., Goh K.L., Teo H.H., et. Al // *J. Chemical Physics Letters*. – 2004. – V. 393. – P. 343-346.
41. O.N.Ulenikov, Gromova O.V., Bekhtereva E.S., et al. // *J. Quant. Spectrosc. Rad. Trans.* – 2016. V. 49A.
42. K.G Watson Determination of centrifugal coefficients of asymmetric – top molecules: *J. Chem. Phys.* V. 46. – 1967. – 1949 p.
43. R. Georges, M. Bach, and M. Herman, *Molecular Physics*, vol. 97, no. 2, pp. 279 – 292, 1999.
44. Е.А. Синицын, Е.С. Бехтерева, А.С. Булавенкова, О.Н. Улеников О прецизионном определении структурных и динамических характеристик молекулы селеноводорода на основе экспериментальных данных. – № 9 Изд-во Известия вузов. – 2007.
45. Ф. Банкер Симметрия молекул и молекулярная спектроскопия. – Москва: Изд-во Мир. – 1981. – 400 с.
46. A.G. Maki, J.S. Wells Wavenumber calibration tables from heterodyne frequency measurements (version 1.3). Gaithersburg, MD: National Institute of Standards and Technology. – 1998

47. Е.С. Бехтерева, О.В. Громова, К.Б. Березкин, Н.В. Каширина, И.А. Конов, З. Бауэкэkker Эффект изотпозамещения в многоатомных молекулах на примере $^{12}\text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow ^{13}\text{C}_2\text{H}_4$. – Изв. Высших учебных Завед. Физика. Т. 58, №11, 83-88 с.

Заключение

В данной работе были рассмотрены основные положения колебательно-вращательной спектроскопии молекул и сформулированы: особенности решения уравнения Шредингера, модель эффективного гамильтониана, правила отбора и эффект изотопозамещения. Была дана общая характеристика для молекулы этилена – $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$.

Целью работы являлось исследование колебательно-вращательного спектра поглощения молекулы типа ассиметричного волчка, а именно молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$. На основе изотопических соотношений были рассчитаны значения сдвигов центров исследуемых полос и проинтерпретирован спектр в районе полос ν_9 , ν_{11} и $\nu_2 + \nu_{12}$. Определено порядка 3122 энергетических переходов для полосы ν_9 и 2558 для полосы ν_{11} и 447 для полосы $\nu_2 + \nu_{12}$. Определенно 841, 802 и 230 энергий для возбужденных состояний, соответственно. Для данных переходов максимальные значения квантовых чисел J^{\max}/K_a^{\max} – 30/12, 35/16 и 22/15. В процедуре варьирования параметров гамильтониана получены 82 параметра. Численно оценены кариолисовы параметры.

Была решена обратная спектроскопическая задача. В результате решения были получены спектроскопические параметры колебательно-вращательных состояний (таблица 2). Полученный в настоящей работе набор параметров воспроизводит начальные экспериментальные данные с точностью с $d_{\text{rms}} = 3.8 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$.

Список публикаций и апробация работы

1. A.V. Kuznetsov «Analysis of High-Resolution Spectra of the $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ Molecule: the ν_9 band», Collection of scientific papers of the XIV International Conference of Students and Young Scientists "Prospects of Fundamental Sciences Development", 1, 98-101, (2018)
2. A.V. Kuznetsov «Analysis of High-Resolution Spectra of the $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ Molecule: the $\nu_2+\nu_{12}$ band», Collection of scientific papers of the XXV International Conference of HRMS 2017, 25, 150, (2017)
3. A.V. Kuznetsov, A.L. Fomchenko «Analysis of High-Resolution Spectra of the $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ Molecule: the ν_{11} band», Russian Physics Journal. –Vol. 5, iss. 10., (2018)

Приложение А

Таблица 26 – Список переходов, соответствующих полосе ν_{11} молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$

$J K_a K_c$	$J' K'_a K'_c$	$I, \%$	Верх. эн, см^{-1}	$J K_a K_c$	$J' K'_a K'_c$	$I, \%$	Верх. эн, см^{-1}
0 0 0	1 0 1	64.6	2967.85848	2 1 1	1 1 0	70.6	2973.26686
1 0 1	0 0 0	74.5	2971.34459	2 1 1	3 1 2	58.3	2964.15690
1 0 1	2 0 2	56.2	2966.11729	2 1 2	1 1 1	71.5	2972.93704
2 0 2	1 0 1	41.1	2973.07969	2 1 2	3 1 3	57.7	2964.61367
2 0 2	3 0 3	29.1	2964.38323	3 1 2	2 1 1	55.9	2975.08759
3 0 3	2 0 2	40.2	2974.80285	3 1 2	4 1 3	46.2	2962.34221
3 0 3	4 0 4	34.2	2962.66035	3 1 3	2 1 2	56.2	2974.58577
4 0 4	3 0 3	18.6	2976.50862	3 1 3	4 1 4	45.6	2962.94125
4 0 4	5 0 5	14.6	2960.95162	4 1 3	3 1 2	44.6	2976.90621
5 0 5	4 0 4	25.2	2978.19183	4 1 3	4 1 4	91.1	2971.19854
5 0 5	6 0 6	22.7	2959.25999	4 1 3	5 1 4	41.0	2960.53454
6 0 6	5 0 5	10.7	2979.84803	4 1 4	3 1 3	45.0	2976.22632
6 0 6	7 0 7	10.6	2957.58551	4 1 4	4 1 3	92.2	2968.00156
7 0 7	6 0 6	18.4	2981.47453	4 1 4	5 1 5	38.9	2961.26833
7 0 7	8 0 8	18.7	2955.92731	5 1 4	4 1 3	37.3	2978.71814
8 0 8	7 0 7	6.9	2983.07045	5 1 4	5 1 5	93.6	2971.98491
8 0 8	9 0 9	7.7	2954.28286	5 1 4	6 1 5	35.8	2958.73213
9 0 9	8 0 8	14.5	2984.63976	5 1 5	4 1 4	37.2	2977.85753
9 0 9	10 0 10	16.3	2952.64975	5 1 5	5 1 4	92.4	2967.19232
10 0 10	9 0 9	5.9	2986.16671	5 1 5	6 1 6	35.0	2959.59534
10 0 10	11 0 11	7.4	2951.00349	5 1 5	5 1 4	31.3	2980.52261
11 0 11	10 0 10	7.6	2987.69153	5 1 5	6 1 6	93.4	2972.92497
11 0 11	12 0 12	15.7	2949.37454	5 1 5	7 1 6	32.0	2956.93795
12 0 12	11 0 11	5.1	2989.19554	6 1 6	5 1 5	32.7	2979.47821
12 0 12	13 0 13	7.0	2947.73670	6 1 6	6 1 5	95.6	2966.22574
13 0 13	12 0 12	13.1	2990.68804	6 1 6	7 1 7	28.2	2957.92223
13 0 13	14 0 14	18.7	2946.09176	7 1 6	6 1 5	29.0	2982.31704
14 0 14	13 0 13	6.0	2992.17196	7 1 6	7 1 7	95.3	2974.01439
14 0 14	15 0 15	10.2	2944.43820	7 1 6	8 1 7	27.9	2955.15311
15 0 15	14 0 14	6.6	2993.64910	7 1 7	6 1 6	27.7	2981.08762
15 0 15	16 0 16	20.3	2942.77585	7 1 7	7 1 6	95.4	2965.10099
16 0 16	15 0 15	6.9	2995.12166	7 1 7	8 1 8	28.3	2956.25060
16 0 16	17 0 17	12.4	2941.10480	8 1 7	7 1 6	23.2	2984.09784
17 0 17	16 0 16	19.3	2996.58895	8 1 7	8 1 8	90.7	2975.24744
17 0 17	18 0 18	27.1	2939.42522	8 1 7	9 1 8	27.6	2953.37882
18 0 18	17 0 17	6.4	2998.05118	8 1 8	7 1 7	26.0	2982.68506
18 0 18	19 0 19	17.3	2937.73700	8 1 8	8 1 7	96.8	2963.82410
19 0 19	18 0 18	24.7	2999.50768	8 1 8	9 1 9	17.5	2954.57815
19 0 19	20 0 20	33.7	2936.04102	9 1 8	8 1 7	23.4	2985.85978
20 0 20	19 0 19	15.3	3000.95867	9 1 8	9 1 9	43.3	2976.62386
20 0 20	21 0 21	22.9	2934.33723	9 1 8	10 1 9	27.3	2951.61448

21 0 21	20 0 20	30.6	3002.40357	9 1 9	8 1 8	22.9	2984.26999
21 0 21	22 0 22	40.1	2932.62590	9 1 9	9 1 8	97.9	2962.40190
22 0 22	21 0 21	20.6	3003.84230	9 1 9	10 1 10	23.9	2952.90701
22 0 22	23 0 23	31.2	2930.90800	10 1 9	9 1 8	29.2	2987.58230
23 0 23	22 0 22	38.5	3005.27445	10 1 9	11 1 10	5.4	2949.84400
23 0 23	24 0 24	42.4	2929.18296	10 1 10	9 1 9	21.9	2985.84224
24 0 24	23 0 23	26.5	3006.70037	10 1 10	11 1 11	16.2	2951.23566
24 0 24	25 0 25	34.4	2927.45063	11 1 10	10 1 9	26.7	2989.36982
25 0 25	24 0 24	48.3	3008.11716	11 1 10	12 1 11	34.2	2948.18087
25 0 25	26 0 26	47.1	2925.71145	11 1 11	10 1 10	21.7	2987.40181
26 0 26	25 0 25	35.7	3009.52742	11 1 11	12 1 12	25.2	2949.56142
26 0 26	27 0 27	42.7	2923.96483	12 1 11	11 1 10	23.4	2991.05594
27 0 27	26 0 26	47.5	3010.93047	12 1 11	13 1 12	31.9	2946.46007
27 0 27	28 0 28	55.7	2922.21078	12 1 12	11 1 11	21.3	2988.94879
28 0 28	27 0 27	41.8	3012.32840	12 1 12	13 1 13	25.7	2947.88643
28 0 28	29 0 29	53.5	2920.45252	13 1 12	12 1 11	4.7	2992.72443
29 0 29	28 0 28	27.7	3013.72282	13 1 12	14 1 13	34.4	2944.77027
29 0 29	30 0 30	67.7	2918.68665	13 1 13	12 1 12	21.7	2990.48355
30 0 30	29 0 29	52.2	3015.09744	13 1 13	14 1 14	27.5	2946.20898
30 0 30	31 0 31	66.7	2916.91395	14 1 13	13 1 12	34.4	2994.38156
31 0 31	30 0 30	67.1	3016.47131	14 1 13	15 1 14	44.0	2943.12183
31 0 31	32 0 32	78.6	2915.13532	14 1 14	13 1 13	22.9	2992.00654
32 0 32	31 0 31	32.5	3017.83769	14 1 14	15 1 15	29.4	2944.52855
32 0 32	33 0 33	77.7	2913.34872	15 1 14	14 1 13	30.6	2995.88665
33 0 33	32 0 32	46.1	3019.21205	15 1 14	16 1 15	39.8	2941.37158
33 0 33	34 0 34	91.3	2911.56729	15 1 15	14 1 14	24.0	2993.51822
34 0 34	33 0 33	78.8	3020.53879	15 1 15	16 1 16	31.2	2942.84436
34 0 34	35 0 35	88.2	2909.75261	16 1 15	15 1 14	29.2	2997.46558
35 0 35	34 0 34	70.2	3021.88522	16 1 15	17 1 16	14.9	2939.74497
35 0 35	36 0 36	91.9	2907.95183	16 1 16	15 1 15	26.0	2995.01911
36 0 36	35 0 35	17.3	3023.21925	16 1 16	17 1 17	33.5	2941.15611
37 0 37	36 0 36	37.0	3024.54159	17 1 16	16 1 15	31.1	2998.99563
37 0 37	38 0 38	95.1	2904.32244	17 1 16	18 1 17	41.1	2938.10474
38 0 38	37 0 37	89.2	3025.85798	17 1 17	16 1 16	11.4	2996.50979
38 0 38	39 0 39	96.8	2902.49415	17 1 17	18 1 18	36.5	2939.46306
38 0 38	37 0 37	6.4	3025.85860	18 1 17	17 1 16	32.1	3000.49324
38 0 38	39 0 39	40.4	2902.49405	18 1 17	19 1 18	45.3	2936.46617
				18 1 18	17 1 17	30.4	2997.99050
				18 1 18	19 1 19	36.9	2937.76513
				19 1 18	18 1 17	34.8	3001.96705
				19 1 18	20 1 19	49.2	2934.82472
				19 1 19	18 1 18	34.9	2999.46204
				19 1 19	20 1 20	43.8	2936.06131
				20 1 19	19 1 18	38.8	3003.42278
				20 1 19	21 1 20	53.2	2933.17751
				20 1 20	19 1 19	26.5	3000.92004
2 2 0	2 2 1	26.7	2969.67076	3 3 0	3 3 1	14.2	2969.74402

2 2 0	3 2 1	50.2	2964.41624	3 3 0	4 3 1	52.8	2962.76078
2 2 1	2 2 0	38.0	2969.66115	3 3 1	3 3 0	14.2	2969.74402
2 2 1	3 2 2	64.8	2964.43448	3 3 1	4 3 2	52.8	2962.76078
3 2 1	2 2 0	61.8	2974.91171	4 3 1	3 3 0	49.9	2976.72187
3 2 1	3 2 2	40.9	2969.62076	4 3 3	4 3 2	10.2	2969.72672
3 2 1	4 2 2	45.6	2962.64386	4 3 1	5 3 2	36.1	2961.00344
3 2 2	2 2 1	49.4	2974.89163	4 3 0	3 3 1	49.9	2976.72187
3 2 2	3 2 1	41.0	2969.63706	4 3 2	4 3 1	10.2	2969.72672
3 2 2	4 2 3	32.4	2962.68859	4 3 2	5 3 3	36.1	2961.00344
4 2 2	3 2 1	30.6	2976.67438	5 3 2	4 3 1	34.1	2978.46335
4 2 2	4 2 3	10.2	2969.72672	5 3 2	5 3 3	10.2	2969.72672
4 2 2	5 2 3	23.3	2960.85630	5 3 4	6 3 3	33.6	2959.24191
4 2 3	3 2 2	43.3	2976.62386	5 3 1	4 3 2	34.1	2978.46335
4 2 3	4 2 2	61.3	2969.58331	5 3 3	5 3 2	10.2	2969.72672
4 2 3	5 2 4	14.6	2960.95162	5 3 5	6 3 4	33.6	2959.24191
5 2 3	4 2 2	33.6	2978.45212	6 3 3	5 3 2	33.5	2980.20644
5 2 3	5 2 4	20.4	2969.80748	6 3 5	6 3 4	10.2	2969.72672
5 2 3	6 2 4	30.1	2959.05223	6 3 5	7 3 4	41.3	2957.47082
5 2 4	4 2 3	20.6	2978.35060	6 3 4	5 3 3	33.5	2980.20644
5 2 4	5 2 3	59.5	2969.48109	6 3 2	6 3 3	62.2	2969.71218
5 2 4	6 2 5	17.4	2959.20075	6 3 4	7 3 5	42.3	2957.48073
6 2 4	5 2 3	14.8	2980.24799	7 3 2	6 3 3	40.0	2981.95796
6 2 4	6 2 5	9.0	2969.97096	7 3 4	7 3 5	10.2	2969.72672
6 2 4	7 2 5	13.8	2957.23130	7 3 6	8 3 5	39.2	2955.69468
6 2 5	5 2 4	27.3	2980.07082	7 3 3	6 3 4	40.1	2981.94566
6 2 5	6 2 4	76.3	2969.31009	7 3 5	7 3 4	43.1	2969.69431
6 2 5	7 2 6	25.9	2957.46007	7 3 5	8 3 6	10.6	2955.72166
7 2 5	6 2 4	22.9	2982.06434	8 3 3	7 3 4	34.1	2983.71266
7 2 5	7 2 6	37.6	2970.20623	8 3 5	8 3 6	10.2	2969.72672
7 2 5	8 2 6	20.7	2955.39559	8 3 7	9 3 6	36.4	2953.91022
7 2 6	6 2 5	12.3	2981.78320	8 3 6	7 3 5	35.1	2983.68789
7 2 6	7 2 5	72.3	2969.04684	8 3 4	8 3 5	38.0	2969.66115
7 2 6	8 2 7	10.6	2955.72166	8 3 6	9 3 7	35.8	2953.94550
8 2 6	7 2 5	9.7	2983.90033	9 3 4	8 3 5	32.0	2985.47555
8 2 6	8 2 7	39.7	2970.57016	9 3 6	9 3 7	31.5	2969.76865
8 2 6	9 2 7	9.4	2953.54831	9 3 8	10 3 7	34.9	2952.11602
8 2 7	7 2 6	18.8	2983.48711	9 3 5	8 3 6	32.1	2985.42993
8 2 7	8 2 6	82.9	2968.66862	9 3 7	9 3 6	79.0	2969.60279
8 2 7	9 2 8	19.7	2953.98701	9 3 8	10 3 8	34.4	2952.17481
9 2 7	8 2 6	17.0	2985.75343	10 3 7	9 3 6	28.1	2987.24936
9 2 7	9 2 8	59.9	2971.07499	10 3 9	10 3 8	12.3	2969.81958
9 2 7	10 2 8	19.9	2951.69491	10 3 7	11 3 8	33.9	2950.31065
9 2 8	8 2 7	8.5	2985.18113	10 3 6	9 3 7	29.8	2987.17122
9 2 8	9 2 7	77.2	2968.15378	10 3 6	10 3 7	82.7	2969.52169
9 2 8	10 2 9	9.5	2952.25541	10 3 8	11 3 9	33.7	2950.40315
10 2 8	9 2 7	6.9	2987.61819	11 3 6	10 3 7	27.8	2989.03701
10 2 8	10 2 9	82.6	2971.71974	11 3 8	11 3 9	30.5	2969.91289

10 2 9	9 2 8	15.2	2986.86449	11 3 10	12 3 9	33.1	2948.49291
10 2 9	10 2 8	88.7	2967.48748	11 3 9	10 3 8	29.1	2988.91087
11 2 9	10 2 8	15.1	2989.48845	11 3 9	11 3 8	76.6	2969.39797
11 2 9	12 2 10	21.0	2947.99096	11 3 11	12 3 10	34.5	2948.63143
11 2 10	10 2 9	6.8	2988.53562	12 3 7	11 3 8	27.9	2990.84179
11 2 10	12 2 11	10.0	2948.80370	12 3 11	12 3 10	17.4	2970.07218
12 2 1	11 2 9	7.1	2991.35687	12 3 10	13 3 10	35.1	2946.66198
12 2 1	13 2 11	10.4	2946.14970	12 3 10	11 3 9	28.4	2990.64847
12 2 1	11 2 10	15.3	2990.19423	12 3 10	12 3 9	88.6	2969.22294
12 2 1	13 2 12	20.6	2947.08370	12 3 10	13 3 11	36.0	2946.86135
13 2 1	12 2 10	11.6	2993.21747	13 3 10	12 3 9	27.9	2992.66603
13 2 1	14 2 12	23.5	2944.32052	13 3 12	13 3 11	49.4	2970.30258
13 2 1	12 2 11	6.7	2991.83890	13 3 10	14 3 11	36.6	2944.81786
13 2 1	14 2 13	7.5	2945.36611	13 3 11	12 3 10	34.5	2992.37187
14 2 1	13 2 11	7.4	2995.06443	13 3 11	13 3 10	92.4	2968.96062
14 2 1	15 2 13	14.1	2942.50502	13 3 11	14 3 12	42.9	2945.08284
14 2 1	13 2 12	16.2	2993.46926	14 3 11	13 3 10	24.8	2994.51123
14 2 1	15 2 14	24.1	2943.65445	14 3 11	15 3 12	39.2	2942.96154
15 2 1	14 2 12	18.0	2996.89286	14 3 10	13 3 11	29.1	2994.10278
15 2 1	16 2 14	28.4	2940.70491	14 3 12	15 3 13	39.1	2943.32015
15 2 1	14 2 13	8.7	2995.08435	15 3 12	14 3 11	31.1	2996.37924
15 2 1	16 2 15	14.8	2941.94462	15 3 12	16 3 13	38.1	2941.09571
16 2 1	15 2 13	8.9	2998.69878	15 3 11	14 3 12	28.3	2995.82193
16 2 1	17 2 15	17.8	2938.92083	15 3 13	16 3 14	21.6	2941.55849
16 2 1	15 2 14	20.0	2996.68405	16 3 13	15 3 12	34.1	2998.22609
16 2 1	17 2 16	28.5	2940.23761	16 3 15	17 3 14	97.4	2939.18129
17 2 1	16 2 14	18.8	3000.47771	16 3 14	15 3 13	33.6	2997.53195
17 2 1	18 2 16	33.7	2937.15336	16 3 16	17 3 15	43.8	2939.79565
17 2 1	16 2 15	5.6	2998.26729	17 3 14	16 3 13	49.8	3000.14810
17 2 1	18 2 17	18.4	2938.53243	17 3 16	18 3 15	60.5	2937.32659
18 2 1	17 2 15	12.1	3002.22424	17 3 15	16 3 14	36.2	2999.23124
18 2 1	19 2 17	24.1	2935.40175	17 3 17	18 3 16	26.0	2938.03183
18 2 1	17 2 16	24.8	2999.83616	18 3 15	17 3 14	37.2	3002.08881
18 2 1	19 2 18	35.1	2936.82873	18 3 1	19 3 16	50.0	2935.48320
19 2 1	18 2 16	27.3	3003.93137	18 3 15	17 3 14	37.2	3002.08881
19 2 1	20 2 18	42.5	2933.66260	18 3 17	19 3 16	50.0	2935.48320
19 2 1	18 2 17	16.3	3001.38872	19 3 16	18 3 15	37.5	3004.00451
19 2 1	20 2 19	24.4	2935.12551	19 3 18	20 3 17	54.7	2933.61935
20 2 1	19 2 17	24.1	3005.57726	19 3 15	18 3 16	42.2	3002.59229
20 2 1	21 2 19	38.9	2931.91695	19 3 19	20 3 18	53.9	2934.53873
20 2 1	19 2 18	31.4	3002.92609	20 3 17	19 3 16	42.7	3005.91447
20 2 1	21 2 20	43.5	2933.42224	20 3 17	21 3 18	60.0	2931.76828
21 2 1	21 2 20	6.8	2988.53562	20 3 16	19 3 17	43.3	3004.25160
21 2 2	20 2 19	16.9	3004.44885	20 3 18	21 3 19	56.4	2932.79536
21 2 2	22 2 21	24.4	2931.71881	21 3 16	20 3 17	49.6	3007.81230
22 2 2	21 2 19	39.3	3008.75312	21 3 18	22 3 19	47.3	2929.93359
22 2 2	21 2 20	33.4	3005.95728	21 3 19	20 3 18	49.2	3005.89486

22 2 2	23 2 22	53.3	2930.01207	21 3 19	22 3 20	62.5	2931.05609
23 2 2	23 2 22	73.5	2992.63170	22 3 17	21 3 18	53.1	3009.68971
23 2 2	22 2 21	28.7	3007.45318	22 3 19	23 3 20	68.9	2928.11154
23 2 2	24 2 23	44.9	2928.30446	22 3 20	21 3 19	53.7	3007.52170
24 2 2	23 2 21	74.1	3011.72900	22 3 20	23 3 21	65.6	2929.32084
24 2 2	23 2 22	45.6	3008.92943	23 3 20	22 3 19	32.0	3011.54002
24 2 2	25 2 24	62.5	2926.58745	23 3 22	24 3 21	72.9	2926.30848
25 2 2	25 2 24	64.9	2996.66194	23 3 21	22 3 20	54.0	3009.13050
25 2 2	24 2 23	32.6	3010.40365	23 3 21	24 3 22	71.2	2927.58920
25 2 2	26 2 25	56.3	2924.87493	24 3 19	23 3 20	62.5	3013.35977
26 2 2	25 2 23	70.3	3014.47100	24 3 21	25 3 22	76.1	2924.52220
26 2 2	25 2 24	58.0	3011.86168	24 3 20	23 3 21	46.3	3010.72460
26 2 2	27 2 26	72.7	2923.15526	24 3 22	25 3 23	75.0	2925.86041
27 2 2	26 2 24	64.6	3015.81866	25 3 22	24 3 21	39.8	3015.13256
27 2 2	26 2 25	50.7	3013.31049	25 3 24	26 3 23	78.7	2922.74917
27 2 2	28 2 27	66.7	2921.43121	25 3 23	24 3 22	64.0	3012.29630
28 2 2	27 2 25	20.5	3017.08750	25 3 23	26 3 24	78.4	2924.13350
28 2 2	27 2 26	69.0	3014.74784	26 3 23	26 3 24	15.2	2986.86449
28 2 2	29 2 28	80.2	2919.70204	26 3 25	27 3 24	71.6	2921.14959
29 2 2	28 2 26	58.3	3018.36827	26 3 24	25 3 23	34.1	3013.85005
29 2 2	28 2 27	62.6	3016.17618	26 3 25	27 3 25	80.9	2922.40734
29 2 2	30 2 29	76.3	2917.96770				
4 4	4 4 1	4.7	2969.85108	5 5 0	5 5 1	12.1	2969.98120
4 4	5 4 1	42.1	2961.12334	5 5 0	6 5 1	65.4	2959.51018
4 4	4 4 0	4.7	2969.85108	5 5 1	5 5 0	12.1	2969.98120
4 4	5 4 2	42.1	2961.12334	5 5 1	6 5 2	65.4	2959.51018
5 4	4 4 0	37.0	2978.57024	6 5 1	5 5 0	60.7	2980.44205
5 4	5 4 2	5.7	2969.84256	6 5 1	6 5 2	9.0	2969.97096
5 4	6 4 2	22.7	2959.36576	6 5 3	7 5 2	46.9	2957.75181
5 4	4 4 1	37.0	2978.57024	6 5 2	5 5 1	60.7	2980.44205
5 4	5 4 1	5.7	2969.84256	6 5 2	6 5 1	9.0	2969.97096
5 4	6 4 3	22.7	2959.36576	6 5 2	7 5 3	46.9	2957.75181
6 4	5 4 2	19.8	2980.30837	7 5 2	6 5 1	41.1	2982.17728
6 4	6 4 2	10.1	2969.83226	7 5 2	7 5 3	20.2	2969.95812
6 4	7 4 4	14.1	2957.60493	7 5 2	8 5 3	36.3	2955.99070
6 4	5 4 1	19.8	2980.30837	7 5 3	6 5 2	41.1	2982.17728
6 4	6 4 3	10.1	2969.83226	7 5 3	7 5 2	20.2	2969.95812
6 4	7 4 3	14.1	2957.60493	7 5 3	8 5 4	36.3	2955.99070
7 4	6 4 2	12.7	2982.04671	8 5 3	7 5 2	32.0	2983.91237
7 4	7 4 4	12.3	2969.81958	8 5 3	8 5 4	27.1	2969.94476
7 4	8 4 4	10.1	2955.84069	8 5 3	9 5 4	30.5	2954.22672
7 4	6 4 3	12.7	2982.04671	8 5 4	7 5 3	32.0	2983.91237
7 4	7 4 3	12.3	2969.81958	8 5 4	8 5 3	27.1	2969.94476
7 4	8 4 5	10.1	2955.84069	8 5 4	9 5 5	30.5	2954.22672
8 4	7 4 3	8.4	2983.78584	9 5 4	8 5 3	26.7	2985.64727
8 4	8 4 5	20.4	2969.80748	9 5 4	9 5 5	26.3	2969.92980

8 4	9 4 5	8.0	2954.07278	9 5 4	10 5 5	27.0	2952.45983
8 4	7 4 4	8.4	2983.78584	9 5 5	8 5 4	26.7	2985.64727
8 4	8 4 4	20.4	2969.80748	9 5 5	9 5 4	26.3	2969.92980
8 4	9 4 6	8.0	2954.07278	9 5 5	10 5 6	27.0	2952.45983
9 4	8 4 4	6.6	2985.52584	10 5 5	9 5 4	22.9	2987.38229
9 4	9 4 6	27.0	2969.79201	10 5 5	10 5 6	30.5	2969.91289
9 4	0 4 6	7.5	2952.30157	10 5 5	11 5 6	25.0	2950.69001
9 4	8 4 5	6.6	2985.52584	10 5 6	9 5 5	22.9	2987.38229
9 4	9 4 5	27.0	2969.79201	10 5 6	10 5 5	30.5	2969.91289
9 4	0 4 7	7.5	2952.30157	10 5 6	11 5 7	25.0	2950.69001
10 4	9 4 5	5.9	2987.26793	11 5 6	10 5 5	20.2	2989.11780
10 4	10 4 7	27.0	2969.79201	11 5 6	11 5 7	48.3	2969.89507
10 4	11 4 7	2.3	2950.52655	11 5 6	12 5 7	24.5	2948.91709
10 4	9 4 6	5.9	2987.26793	11 5 7	10 5 6	20.2	2989.11780
10 4	10 4 6	31.5	2969.76865	11 5 7	11 5 6	48.3	2969.89507
10 4	11 4 8	2.3	2950.52655	11 5 7	12 5 8	24.5	2948.91709
11 4	10 4 6	8.6	2989.01006	12 5 7	11 5 6	9.3	2990.85389
11 4	11 4 8	31.5	2969.76865	12 5 7	12 5 8	52.8	2969.87631
11 4	12 4 8	15.2	2948.74971	12 5 7	13 5 8	24.9	2947.14113
11 4	10 4 7	8.6	2989.01006	12 5 8	11 5 7	19.3	2990.85389
11 4	11 4 7	14.2	2969.74402	12 5 8	12 5 7	52.8	2969.87631
11 4	12 4 9	15.2	2948.74971	12 5 8	13 5 9	24.9	2947.14113
12 4	11 4 7	10.5	2990.76268	13 5 8	12 5 7	19.1	2992.59102
12 4	12 4 9	14.2	2969.74402	13 5 8	14 5 9	7.5	2945.36611
12 4	13 4 9	17.8	2946.95665	13 5 9	12 5 8	19.1	2992.59102
12 4	11 4 8	10.5	2990.76268	13 5 9	14 5 10	7.5	2945.36611
12 4	12 4 8	10.2	2969.72672	14 5 9	13 5 8	19.4	2994.32960
12 4	13 4 10	30.9	2946.96925	14 5 9	15 5 10	27.5	2943.57966
13 4	12 4 8	24.3	2992.51628	14 5 10	13 5 9	19.4	2994.32960
13 4	13 4 10	14.2	2969.74402	14 5 10	15 5 11	27.5	2943.57966
13 4	14 4 10	32.1	2945.16463	15 5 10	14 5 9	21.0	2996.06985
13 4 1	12 4 9	12.1	2992.49813	15 5 10	16 5 11	30.8	2941.79418
13 4 1	13 4 9	43.1	2969.68714	15 5 11	14 5 10	21.0	2996.06985
13 4 1	14 4 11	18.9	2945.18547	15 5 11	16 5 12	30.8	2941.79418
14 4 1	13 4 9	13.5	2994.27590	16 5 11	15 5 10	14.4	2997.82052
14 4 1	14 4 11	31.5	2969.76865	16 5 11	17 5 12	38.1	2940.00540
14 4 1	15 4 11	20.7	2943.36615	16 5 12	15 5 11	14.4	2997.82052
14 4 1	13 4 10	25.6	2994.24509	16 5 12	17 5 13	38.1	2940.00540
14 4 1	14 4 10	38.0	2969.66115	17 5 12	16 5 11	43.1	2999.55461
14 4 1	15 4 12	33.3	2943.39930	17 5 12	18 5 13	51.5	2938.21233
15 4 1	14 4 10	26.6	2996.04351	17 5 13	16 5 12	43.1	2999.55461
15 4 1	15 4 12	27.0	2969.79201	17 5 13	18 5 14	51.5	2938.21233
15 4 1	16 4 12	21.6	2941.55849	18 5 13	17 5 12	50.7	3001.31082
15 4 1	14 4 11	13.9	2995.99311	18 5 13	19 5 14	60.1	2936.41313
15 4 1	15 4 11	61.3	2969.58331	18 5 14	17 5 13	50.3	3001.29870
15 4 1	16 4 13	22.5	2941.61112	18 5 14	19 5 15	60.9	2936.42316
16 4 1	15 4 11	14.4	2997.82052	19 5 14	18 5 13	53.3	3003.06588

16 4 1	16 4 13	10.1	2969.83226	19 5 14	20 5 15	64.6	2934.61148
16 4 1	17 4 13	14.9	2939.74497	19 5 15	18 5 14	53.6	3003.04600
16 4 1	15 4 12	28.3	2997.74182	19 5 15	20 5 16	63.9	2934.62742
16 4 1	16 4 12	85.8	2969.51026				
16 4 1	17 4 14	38.1	2939.82170				
17 4 1	16 4 12	30.8	2999.60995				
17 4 1	17 4 14	30.5	2969.91289				
17 4 1	18 4 14	41.7	2937.92231				
17 4 1	16 4 13	18.1	2999.49037				
17 4 1	18 4 15	26.0	2938.03183				
18 4 1	17 4 13	20.0	3001.41903				
18 4 1	18 4 15	20.3	2970.05480				
18 4 1	19 4 15	29.6	2936.09318				
18 4 1	17 4 14	33.5	3001.23795				
18 4 1	19 4 16	45.3	2936.24134				
19 4 1	19 4 16	22.9	2970.24432				
19 4 1	20 4 16	49.2	2934.24917				
19 4 1	18 4 15	23.0	3002.98316				
19 4 1	20 4 17	34.9	2934.45188				
20 4 1	19 4 15	25.9	3005.08601				
20 4 1	21 4 17	39.6	2932.39540				
20 4 1	19 4 16	39.3	3004.72466				
20 4 1	21 4 18	52.7	2932.66406				
6 6 0	6 6 1	3.2	2970.12989	7 7 0	7 7 1	15.8	2970.29173
6 6 0	7 6 1	28.2	2957.92223	7 7 0	8 7 1	78.1	2956.33625
6 6 1	6 6 0	3.2	2970.12989	7 7 1	7 7 0	15.8	2970.29173
6 6 1	7 6 2	28.2	2957.92223	7 7 1	8 7 2	78.1	2956.33625
7 6 1	6 6 0	54.4	2982.33186	8 7 1	7 7 0	75.5	2984.23328
7 6 1	7 6 2	7.4	2970.11789	8 7 1	8 7 2	19.5	2970.27703
7 6 1	8 6 2	37.3	2956.15723	8 7 1	9 7 2	17.5	2954.57815
7 6 2	6 6 1	54.4	2982.33186	8 7 2	7 7 1	75.5	2984.23328
7 6 2	7 6 1	7.4	2970.11789	8 7 2	8 7 1	19.5	2970.27703
7 6 2	8 6 3	37.3	2956.15723	8 7 2	9 7 3	17.5	2954.57815
8 6 2	7 6 1	33.0	2984.06490	9 7 2	8 7 1	59.8	2985.96358
8 6 2	8 6 3	9.5	2970.10414	9 7 2	9 7 3	27.6	2970.26183
8 6 2	9 6 3	27.4	2954.39566	9 7 2	10 7 3	55.7	2952.81350
8 6 3	7 6 2	33.0	2984.06490	9 7 3	8 7 2	59.8	2985.96358
8 6 3	8 6 2	9.5	2970.10414	9 7 3	9 7 2	27.6	2970.26180
8 6 3	9 6 4	27.4	2954.39566	9 7 3	10 7 4	55.7	2952.81350
9 6 3	8 6 2	22.8	2985.79729	10 7 3	9 7 2	7.6	2987.69153
9 6 3	9 6 4	13.4	2970.08904	10 7 3	10 7 4	23.1	2970.24434
9 6 3	10 6 4	22.7	2952.63176	10 7 3	11 7 4	50.5	2951.04872
9 6 4	8 6 3	22.8	2985.79729	10 7 4	9 7 3	7.6	2987.69153
9 6 4	9 6 3	13.4	2970.08904	10 7 4	10 7 3	22.9	2970.24432

9 6 4	10 6 5	22.7	2952.63176	10 7 4	11 7 5	50.5	2951.04872
10 6 4	9 6 3	16.8	2987.52934	11 7 4	10 7 3	44.9	2989.42148
10 6 4	10 6 5	17.4	2970.07218	11 7 4	11 7 5	39.1	2970.22569
10 6 4	11 6 5	18.9	2950.86549	11 7 4	12 7 5	47.8	2949.28171
10 6 5	9 6 4	16.8	2987.52934	11 7 5	10 7 4	44.9	2989.42148
10 6 5	10 6 4	17.4	2970.07218	11 7 5	11 7 4	39.1	2970.22569
10 6 5	11 6 6	18.9	2950.86549	11 7 5	12 7 6	47.8	2949.28171
11 6 5	10 6 4	15.1	2989.26110	12 7 5	11 7 4	42.2	2991.14928
11 6 5	11 6 6	20.3	2970.05480	12 7 5	12 7 6	37.6	2970.20623
11 6 5	12 6 6	17.6	2949.09684	12 7 5	13 7 6	45.6	2947.51246
11 6 6	10 6 5	15.1	2989.26110	12 7 6	11 7 5	42.2	2991.14928
11 6 6	11 6 5	20.3	2970.05480	12 7 6	12 7 5	37.6	2970.20623
11 6 6	12 6 7	17.6	2949.09684	12 7 6	13 7 7	45.6	2947.51246
12 6 6	11 6 5	13.1	2990.99300	13 7 6	12 7 5	40.5	2992.87640
12 6 6	12 6 7	38.5	2970.03524	13 7 6	13 7 7	42.2	2970.18397
12 6 6	13 6 7	17.6	2947.32590	13 7 6	14 7 7	45.7	2945.74089
12 6 7	11 6 6	13.1	2990.99300	13 7 7	12 7 6	40.5	2992.87640
12 6 7	12 6 6	38.5	2970.03524	13 7 7	13 7 6	42.2	2970.18397
12 6 7	13 6 8	17.6	2947.32590	13 7 7	14 7 8	45.7	2945.74089
13 6 7	12 6 6	4.7	2992.72443	14 7 7	13 7 6	39.9	2994.60294
13 6 7	13 6 8	38.5	2970.01567	14 7 7	14 7 8	58.5	2970.15990
13 6 7	14 6 8	18.1	2945.55266	14 7 7	15 7 8	47.7	2943.96686
13 6 8	12 6 7	4.7	2992.72443	14 7 8	13 7 7	39.9	2994.60294
13 6 8	13 6 7	38.5	2970.01567	14 7 8	14 7 7	58.5	2970.15990
13 6 8	14 6 9	18.1	2945.55266	14 7 8	15 7 9	47.7	2943.96686
14 6 8	13 6 7	12.5	2994.45791	15 7 8	14 7 7	41.1	2996.32876
14 6 8	14 6 9	43.4	2969.99509	15 7 8	16 7 9	50.2	2942.19021
14 6 8	15 6 9	18.7	2943.77728	15 7 9	14 7 8	41.1	2996.32876
14 6 9	13 6 8	12.5	2994.45791	15 7 9	16 7 10	50.2	2942.19021
14 6 9	14 6 8	43.4	2969.99509	16 7 9	15 7 8	72.3	2998.07281
14 6 9	15 6 10	18.7	2943.77728	16 7 9	17 7 10	84.9	2940.42960
15 6 9	14 6 8	12.9	2996.19140	16 7 10	15 7 9	72.3	2998.07281
15 6 9	16 6 10	21.1	2941.99967	16 7 10	17 7 11	84.9	2940.42960
15 6 10	14 6 9	12.9	2996.19140	17 7 10	16 7 9	79.7	2999.76597
15 6 10	16 6 11	21.1	2941.99967	17 7 10	18 7 11	84.2	2938.61607
16 6 10	15 6 9	14.4	2997.92602	17 7 11	16 7 10	79.7	2999.76597
16 6 10	17 6 11	23.6	2940.21970	17 7 11	18 7 12	84.2	2938.61607
16 6 11	15 6 10	14.4	2997.92602	18 7 11	17 7 10	45.7	3001.51168
16 6 11	17 6 12	23.6	2940.21970	18 7 11	19 7 12	56.2	2936.85276
17 6 11	16 6 10	18.1	2999.66413	18 7 12	17 7 11	45.7	3001.51168
17 6 11	18 6 12	27.0	2938.44009	18 7 12	19 7 13	56.2	2936.85276
17 6 12	16 6 11	18.1	2999.66413				
17 6 12	18 6 13	27.0	2938.44009				
18 6 12	17 6 11	29.7	3001.40576				
18 6 12	19 6 13	38.8	2936.65928				
18 6 13	17 6 12	29.7	3001.40576				

18 6 13	19 6 14	38.8	2936.65928				
19 6 13	18 6 12	51.9	3003.15534				
19 6 13	20 6 14	62.8	2934.88342				
19 6 14	18 6 13	37.8	3003.14109				
19 6 14	20 6 15	50.1	2934.87073				
20 6 14	19 6 13	45.4	3004.86616				
20 6 14	20 6 15	4.7	2969.85108				
20 6 15	19 6 14	54.3	3004.88376				
20 6 15	21 6 16	66.0	2933.08411				
8 8 0	8 8 1	9.2	2970.45888	9 9 0	9 9 1	29.7	2970.62478
8 8 0	9 8 1	72.7	2954.76286	9 9 0	10 9 1	88.5	2953.18949
8 8 1	8 8 0	9.2	2970.45888	9 9 1	9 9 0	29.7	2970.62478
8 8 1	9 8 2	72.7	2954.76286	9 9 1	10 9 2	88.5	2953.18949
9 8 1	8 8 0	71.4	2986.13932	10 9 1	9 9 0	85.5	2988.04316
9 8 1	9 8 2	10.2	2970.44325	10 9 1	10 9 2	26.8	2970.60722
9 8 1	10 8 2	59.1	2953.00170	10 9 1	11 9 2	81.0	2951.42795
9 8 2	8 8 1	71.4	2986.13932	10 9 2	9 9 1	85.5	2988.04316
9 8 2	9 8 1	10.2	2970.44325	10 9 2	10 9 1	26.8	2970.60722
9 8 2	10 8 3	59.1	2953.00170	10 9 2	11 9 3	81.0	2951.42795
10 8 2	9 8 1	52.7	2987.86708	11 9 2	10 9 1	76.1	2989.76885
10 8 2	10 8 3	18.0	2970.42546	11 9 2	11 9 3	43.0	2970.58931
10 8 2	11 8 3	16.2	2951.23566	11 9 2	12 9 3	76.3	2949.66442
10 8 3	9 8 2	52.7	2987.86708	11 9 3	10 9 2	76.1	2989.76885
10 8 3	10 8 2	18.0	2970.42546	11 9 3	11 9 2	43.0	2970.58931
10 8 3	11 8 4	16.2	2951.23566	11 9 3	12 9 4	76.3	2949.66442
11 8 3	10 8 2	45.0	2989.59343	12 9 3	11 9 2	72.3	2991.49409
11 8 3	11 8 4	23.4	2970.40617	12 9 3	12 9 4	39.7	2970.57016
11 8 3	12 8 4	45.3	2949.47252	12 9 3	13 9 4	70.8	2947.89907
11 8 4	10 8 3	45.0	2989.59343	12 9 4	11 9 3	72.3	2991.49409
11 8 4	11 8 3	23.4	2970.40617	12 9 4	12 9 3	39.7	2970.57016
11 8 4	12 8 5	45.3	2949.47252	12 9 4	13 9 5	70.8	2947.89907
12 8 4	11 8 3	39.5	2991.31803	13 9 4	12 9 3	11.6	2993.21747
12 8 4	12 8 5	26.9	2970.38480	13 9 4	13 9 5	51.9	2970.54703
12 8 4	13 8 5	43.1	2947.70404	13 9 4	14 9 5	71.3	2946.13188
12 8 5	11 8 4	39.5	2991.31803	13 9 5	12 9 4	11.6	2993.21747
12 8 5	12 8 4	26.9	2970.38470	13 9 5	13 9 4	51.9	2970.54703
12 8 5	13 8 6	43.1	2947.70404	13 9 5	14 9 6	71.3	2946.13188
13 8 5	12 8 4	36.6	2993.03930	14 9 5	13 9 4	65.1	2994.94040
13 8 5	13 8 6	29.3	2970.35870	14 9 5	14 9 6	59.9	2970.52443
13 8 5	14 8 6	41.6	2945.93110	14 9 5	15 9 6	70.8	2944.36295
13 8 6	12 8 5	36.6	2993.03930	14 9 6	13 9 5	65.1	2994.94040
13 8 6	13 8 5	29.3	2970.35870	14 9 6	14 9 5	59.9	2970.52443
13 8 6	14 8 7	41.6	2945.93110	14 9 6	15 9 7	70.8	2944.36295
14 8 6	14 8 7	51.5	2970.33412				
14 8 7	14 8 6	51.5	2970.33412				

15 8 7	15 8 8	49.1	2970.30920				
15 8 8	15 8 7	49.1	2970.30920				
10 10 0	10 10 1	68.0	2970.79514	11 11 0	11 11 1	66.9	2970.92562
10 10 1	10 10 0	68.0	2970.79514	11 11 0	12 11 1	78.3	2950.01611
11 10 1	10 10 0	84.8	2989.93401	11 11 1	11 11 0	66.9	2970.92562
11 10 1	11 10 2	25.6	2970.76056	11 11 1	13 11 2	78.3	2950.01611
11 10 1	12 10 2	5.4	2949.84159	12 11 1	12 11 2	44.8	2970.89589
11 10 2	10 10 1	84.8	2989.93401	12 11 1	13 11 2	85.5	2948.24334
11 10 2	11 10 1	25.6	2970.76056	12 11 2	12 11 1	44.8	2970.89589
11 10 2	12 10 3	5.4	2949.84159	12 11 2	13 11 3	85.5	2948.24334
12 10 2	11 10 1	75.3	2991.65582	13 11 2	12 11 1	24.0	2993.51822
12 10 2	12 10 3	32.8	2970.73841	13 11 2	13 11 3	76.2	2970.86393
12 10 2	13 10 3	74.8	2948.07787	13 11 2	14 11 3	89.5	2946.47825
12 10 3	11 10 2	75.3	2991.65582	13 11 3	12 11 2	24.0	2993.51822
12 10 3	12 10 2	32.8	2970.73841	13 11 3	13 11 2	76.2	2970.86393
12 10 3	13 10 4	74.8	2948.07787	13 11 3	14 11 4	76.4	2946.47044
13 10 3	12 10 2	69.9	2993.37644	14 11 3	13 11 2	83.4	2995.24524
13 10 3	13 10 4	42.1	2970.71554	14 11 3	14 11 4	68.5	2970.84895
13 10 3	14 10 4	70.8	2946.31018	14 11 3	15 11 4	88.0	2944.71044
13 10 4	12 10 3	69.9	2993.37644	14 11 4	13 11 3	83.4	2995.24524
13 10 4	13 10 3	42.1	2970.71554	14 11 4	14 11 3	68.5	2970.84895
13 10 4	14 10 5	70.8	2946.31018	14 11 4	15 11 5	88.0	2944.71044
14 10 4	13 10 3	66.4	2995.09544	15 11 4	14 11 3	83.5	2996.96110
14 10 4	14 10 5	49.7	2970.69050	15 11 4	15 11 5	73.0	2970.82271
14 10 4	15 10 5	69.5	2944.54077	15 11 4	16 11 5	88.0	2942.94078
14 10 5	13 10 4	66.4	2995.09544	15 11 5	14 11 4	83.5	2996.96110
14 10 5	14 10 4	49.7	2970.69050	15 11 5	15 11 4	73.0	2970.82271
14 10 5	15 10 6	69.5	2944.54077	15 11 5	16 11 6	88.0	2942.94078
15 10 5	14 10 4	60.5	2996.81340	16 11 5	15 11 4	84.1	2998.67683
15 10 5	15 10 6	54.9	2970.66410	16 11 5	16 11 6	68.0	2970.79514
15 10 5	16 10 6	20.3	2942.77585	16 11 5	17 11 6	87.3	2941.16972
15 10 6	14 10 5	60.5	2996.81340	16 11 6	15 11 5	84.1	2998.67683
15 10 6	15 10 5	54.9	2970.66410	16 11 6	16 11 5	68.0	2970.79514
15 10 6	16 10 7	20.3	2942.77585	16 11 6	17 11 7	87.3	2941.16972
12 12 0	12 12 1	50.6	2971.02739	14 13 1	13 13 0	23.9	2995.45345
12 12 0	13 12 1	95.9	2948.38393	14 13 1	15 13 2	50.4	2944.95931
12 12 1	12 12 0	50.6	2971.02739	14 13 2	13 13 1	23.9	2995.45345
12 12 1	13 12 2	95.9	2948.38393	14 13 2	15 13 3	50.4	2944.95931
13 12 1	12 12 0	6.6	2993.64910	15 13 2	14 13 1	32.0	2997.16665
13 12 1	13 12 2	56.4	2971.00468	15 13 2	16 13 4	40.8	2943.19193
13 12 1	14 12 2	90.7	2946.61882	15 13 3	14 13 2	32.0	2997.16665
13 12 2	12 12 1	6.6	2993.64910	15 13 3	16 13 4	40.8	2943.19193
13 12 2	13 12 1	56.4	2971.00468	16 13 3	15 13 3	31.2	2998.88020
13 12 2	14 12 3	90.7	2946.61882	16 13 3	17 13 5	36.4	2941.42307
14 12 2	13 12 1	88.8	2995.36584	16 13 4	15 13 3	31.2	2998.88020
14 12 2	14 12 3	57.6	2970.97984	16 13 4	17 13 5	36.4	2941.42307

14 12 2	15 12 3	90.2	2944.85212	17 13 4	16 13 3	31.2	3000.59155
14 12 3	13 12 2	88.8	2995.36584	17 13 4	18 13 5	34.4	2939.65207
14 12 3	14 12 2	57.6	2970.97984	17 13 5	16 13 4	31.2	3000.59155
14 12 3	15 12 4	90.2	2944.85212	17 13 5	18 13 6	34.4	2939.65207
15 12 3	14 12 2	86.2	2997.08234	18 13 5	17 13 4	25.3	3002.30069
15 12 3	15 12 4	65.6	2970.95387	18 13 5	19 13 6	36.3	2937.87984
15 12 3	16 12 4	89.1	2943.08371	18 13 6	17 13 5	25.3	3002.30069
15 12 4	14 12 3	86.2	2997.08234	18 13 6	19 13 7	36.3	2937.87984
15 12 4	15 12 3	65.6	2970.95387				
15 12 4	16 12 5	89.1	2943.08371				
16 12 4	15 12 3	79.3	2998.79627				
16 12 4	17 12 5	88.3	2941.31345				
16 12 5	15 12 4	79.3	2998.79627				
16 12 5	17 12 6	88.3	2941.31345				
17 12 5	16 12 4	85.5	3000.50757				
17 12 5	18 12 6	88.9	2939.54142				
17 12 6	16 12 5	85.5	3000.50757				
17 12 6	18 12 7	88.9	2939.54142				
18 12 6	17 12 5	75.9	3002.18779				
18 12 6	19 12 7	17.3	2937.73704				
18 12 7	17 12 6	75.9	3002.18779				
18 12 7	19 12 8	17.3	2937.73704				
15 14 1	14 14 0	26.4	2997.21308	16 15 1	15 15 0	57.3	2998.90827
15 14 1	16 14 3	41.2	2943.25719	16 15 1	16 15 2	2.0	2971.07245
15 14 2	14 14 1	26.4	2997.21308	16 15 2	15 15 1	57.3	2998.90827
15 14 2	16 14 3	41.2	2943.25719	16 15 2	16 15 1	2.0	2971.07245
16 14 2	15 14 1	32.6	3000.63165	17 15 2	16 15 1	76.3	3000.57594
16 14 2	18 14 4	41.6	2939.71867	17 15 2	18 15 3	82.3	2939.68905
16 14 3	15 14 2	32.6	3000.63165	17 15 3	16 15 2	76.3	3000.57594
16 14 3	17 14 4	41.6	2939.71867	17 15 3	18 15 4	82.3	2939.68905
17 14 3	16 14 2	60.4	3000.56620	18 15 3	17 15 2	1.0	3002.18802
17 14 3	18 14 4	34.4	2939.65207	19 15 4	18 15 3	75.5	3003.75251
17 14 4	16 14 3	60.4	3000.56620	19 15 4	20 15 5	75.5	2935.91102
17 14 4	18 14 5	34.4	2939.65207	20 15 5	19 15 4	72.7	3005.36778
18 14 4	17 14 3	48.7	3002.31688	20 15 5	21 15 6	89.1	2934.04898
18 14 4	19 14 5	40.6	2937.92410	21 15 6	20 15 5	52.7	3006.93564
18 14 5	17 14 4	48.7	3002.31688	21 15 6	22 15 7	66.5	2932.14300
18 14 5	19 14 6	40.6	2937.92410	22 15 7	21 15 6	55.3	3008.51994
19 14 5	18 14 4	40.6	3004.02331	22 15 7	23 15 8	77.0	2930.24046
19 14 5	19 14 6	2.1	2970.95684				
17 16 1	16 16 0	1.0	2999.76530	18 17 1	17 17 0	50.0	3000.72994
17 16 1	18 16 2	55.7	2938.90332	18 17 1	19 17 2	1.9	2936.42393
17 16 2	16 16 1	1.0	2999.76530	18 17 2	17 17 1	50.0	3000.72994
17 16 2	18 16 3	55.7	2938.90332	18 17 2	19 17 3	1.9	2936.42393

18 16 2	17 16 1	1.9	3001.68649	19 17 2	18 17 1	30.6	3002.40355
18 16 2	19 16 3	45.9	2937.35285	19 17 2	20 17 3	1.9	2934.62742
18 16 3	17 16 2	1.9	3001.68649	19 17 3	18 17 2	30.6	3002.40355
18 16 3	19 16 4	45.9	2937.35285	19 17 3	20 17 4	1.9	2934.62742
19 16 3	18 16 2	4.8	3003.49762	20 17 3	19 17 2	2.2	3004.33419
19 16 3	20 16 4	87.4	2935.68735	20 17 3	21 17 4	2.6	2933.08293
19 16 4	18 16 3	4.8	3003.49762	20 17 4	19 17 3	2.2	3004.33419
19 16 4	20 16 5	87.4	2935.68735	20 17 4	21 17 5	2.6	2933.08293
20 16 4	20 16 5	1.4	2970.33594				
20 16 4	21 16 5	39.1	2933.82487				
20 16 5	20 16 4	1.4	2970.33594				
20 16 5	21 16 6	39.1	2933.82487				
19 18 1	18 18 0	52.6	3001.99658	20 19 1	21 19 2	96.5	2932.17929
19 18 1	20 18 3	2.6	2934.25049	20 19 2	21 19 3	96.5	2932.17929
19 18 2	18 18 1	52.6	3001.99658	21 19 2	20 19 1	81.5	3005.15780
19 18 2	20 18 4	2.6	2934.25049	21 19 2	22 19 3	92.4	2930.50947
20 18 2	19 18 1	37.6	3003.55912	21 19 3	20 19 2	81.5	3005.15780
20 18 2	21 18 3	91.5	2932.34357	21 19 3	22 19 4	92.4	2930.50947
20 18 3	19 18 2	37.6	3003.55912	22 19 3	21 19 2	98.2	3006.91549
20 18 3	21 18 4	91.5	2932.34357	22 19 3	23 19 4	99.0	2928.80304
21 18 3	20 18 2	36.4	3005.40483	22 19 4	21 19 3	98.2	3006.91549
21 18 3	22 18 5	93.8	2930.71896	22 19 4	23 19 5	99.0	2928.80304
21 18 4	20 18 3	36.4	3005.40483				
21 18 4	22 18 5	93.8	2930.71896				
20 20 0	21 20 1	91.1	2930.60390				
20 20 1	21 20 2	91.1	2930.60390				
21 20 1	20 20 0	58.1	3003.59095				
21 20 1	22 20 2	91.5	2928.98182				
21 20 2	20 20 1	58.1	3003.59095				
21 20 2	22 20 3	91.5	2928.98182				
22 20 2	21 20 1	35.6	3005.31208				
22 20 2	23 20 3	96.3	2927.23838				
22 20 3	21 20 2	35.6	3005.31208				
22 20 3	23 20 4	96.3	2927.23838				

Таблица 27 – Список переходов, соответствующих полосе ν_9 молекулы $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$

$J K_a K_c$	$J' K'_a K'_c$	$I, \%$	Верх. эн, см^{-1}	$J K_a K_c$	$J' K'_a K'_c$	$I, \%$	Верх. эн, см^{-1}
1 0 1	1 1 0	47.6	3089.72612	2 1 2	1 0 1	21.9	3101.02549
1 0 1	2 1 2	49.9	3086.55266	2 1 2	2 2 1	48.4	3081.56802
2 0 2	1 1 1	71.8	3092.66485	2 1 2	3 0 3	34.7	3092.32899
2 0 2	2 1 1	55.4	3088.86186	2 1 1	2 0 2	22.4	3098.01169
2 0 2	3 1 3	5.4	3084.34040	2 1 1	2 2 0	56.5	3082.03352

3 0 3	2 1 2	58.0	3095.22380	2 1 1	3 2 2	33.7	3076.80594
3 0 3	3 1 2	19.1	3089.28728	3 1 3	2 0 2	26.0	3102.52229
3 0 3	4 1 4	33.3	3083.57907	3 1 3	3 2 2	44.7	3081.31657
4 0 4	3 1 3	35.9	3097.13606	3 1 3	4 0 4	35.9	3090.37988
4 0 4	4 1 3	11.7	3088.91301	3 1 2	3 0 3	5.1	3098.24717
4 0 4	5 1 5	28.7	3082.17938	3 1 2	3 2 1	25.6	3082.23236
5 0 5	4 1 4	34.4	3099.06259	3 1 2	4 2 3	22.9	3075.28364
5 0 5	5 1 4	19.7	3088.39837	4 1 4	3 0 3	10.2	3103.94370
5 0 5	6 1 6	33.5	3080.80014	4 1 4	4 2 3	14.7	3080.98021
6 0 6	5 1 5	32.8	3101.09048	4 1 4	5 0 5	13.2	3088.38706
6 0 6	6 1 5	14.8	3087.83783	4 1 3	4 0 4	7.7	3098.57854
6 0 6	7 1 7	18.4	3079.53494	4 1 3	4 2 2	28.5	3082.47404
7 0 7	6 1 6	21.0	3103.05299	4 1 3	5 2 4	34.0	3073.83513
7 0 7	7 1 6	14.1	3087.06614	5 1 5	4 0 4	13.0	3105.29970
7 0 7	8 1 8	14.4	3078.21567	5 1 5	5 2 4	29.2	3080.55638
8 0 8	7 1 7	17.3	3105.00525	5 1 5	6 0 6	17.6	3086.36797
8 0 8	8 1 7	14.3	3086.14380	5 1 4	5 0 5	3.2	3099.01625
8 0 8	9 1 9	13.4	3076.89894	5 1 4	5 2 3	9.9	3082.73936
9 0 9	8 1 8	13.8	3106.92762	5 1 4	6 2 5	17.8	3072.45911
9 0 9	9 1 8	6.6	3085.05785	6 1 6	5 0 5	4.9	3106.60288
9 0 9	10 1 10	11.8	3075.56450	6 1 6	6 2 5	13.3	3080.04572
10 0 10	9 1 9	11.3	3108.80826	6 1 6	7 0 7	5.4	3084.34040
10 0 10	10 1 9	16.7	3083.80823	6 1 5	6 0 6	5.7	3099.57634
10 0 10	11 1 11	9.9	3074.20063	6 1 5	6 2 4	14.5	3083.00407
11 0 11	10 1 10	9.9	3110.64070	6 1 5	7 2 6	27.3	3071.15421
11 0 11	11 1 10	23.9	3082.39797	7 1 7	6 0 6	3.9	3107.86835
11 0 11	12 1 12	10.5	3072.80028	7 1 7	7 2 6	24.7	3079.44688
12 0 12	11 1 11	6.1	3112.42389	7 1 7	8 0 8	9.8	3082.32209
12 0 12	12 1 11	23.1	3080.84151	7 1 6	7 0 7	2.4	3100.27245
12 0 12	13 1 13	7.4	3071.36064	7 1 6	7 2 5	4.2	3083.24129
13 0 13	12 1 12	9.0	3114.15858	7 1 6	8 2 7	14.7	3069.91654
13 0 13	13 1 12	26.9	3079.15994	8 1 8	7 0 7	2.8	3109.11526
13 0 13	14 1 14	10.2	3069.88401	8 1 8	8 2 7	11.8	3078.75916
14 0 14	13 1 13	9.3	3115.84952	8 1 8	9 0 9	3.5	3080.32767
14 0 14	14 1 13	25.7	3077.37668	8 1 7	8 0 8	6.7	3101.11767
14 0 14	15 1 15	10.8	3068.37155	8 1 7	8 2 6	8.5	3083.42351
15 0 15	14 1 14	9.8	3117.50374	8 1 7	9 2 8	13.3	3068.74163
15 0 15	15 1 14	43.0	3075.52032	9 1 9	8 0 8	6.1	3110.35872
15 0 15	16 1 16	10.9	3066.82985	9 1 9	9 2 8	23.1	3077.98333
16 0 16	15 1 15	9.3	3119.11477	9 1 9	10 0 10	7.6	3078.36864
16 0 16	16 1 15	42.3	3073.61092	9 1 8	9 0 9	2.9	3102.11896
16 0 16	17 1 17	12.9	3065.25040	9 1 8	9 2 7	2.2	3083.52318
17 0 17	16 1 16	10.9	3120.71573	9 1 8	10 2 9	12.7	3067.62467
17 0 17	17 1 16	53.0	3071.68292	10 1 10	9 0 9	2.1	3111.61367
17 0 17	18 1 18	14.3	3063.66909	10 1 10	10 2 9	11.8	3077.11952
18 0 18	17 1 17	12.5	3122.28663	10 1 10	11 0 11	3.2	3076.45018
18 0 18	18 1 17	57.9	3069.74905	10 1 9	10 0 10	7.7	3103.52051

18 0 18	19 1 19	17.6	3062.06098	10 1 9	11 2 10	39.3	3066.79873
19 0 19	18 1 18	14.1	3123.83908	11 1 11	10 0 10	1.7	3112.89042
19 0 19	19 1 18	57.5	3067.82580	11 1 11	11 2 10	28.2	3076.16819
19 0 19	20 1 20	13.2	3060.43802	11 1 11	12 0 12	5.6	3074.57497
20 0 20	19 1 19	16.8	3125.37630	11 1 10	11 0 11	4.6	3104.58776
20 0 20	20 1 19	66.2	3065.92268	11 1 10	11 2 9	2.3	3083.37754
20 0 20	21 1 21	18.6	3058.80328	12 1 12	11 0 11	1.0	3114.19828
21 0 21	20 1 20	19.0	3126.90101	12 1 12	12 2 11	9.7	3075.13638
21 0 21	21 1 20	69.5	3064.04270	12 1 12	13 0 13	1.5	3072.73981
21 0 21	22 1 22	25.6	3057.15908	12 1 11	12 0 12	12.0	3106.03290
22 0 22	21 1 21	22.6	3128.41519	12 1 11	12 2 10	5.9	3083.08936
22 0 22	22 1 21	75.8	3062.18975	12 1 11	13 2 12	24.1	3064.51687
22 0 22	23 1 23	30.3	3055.50660	13 1 13	12 0 12	5.0	3115.53817
23 0 23	22 1 22	27.0	3129.92051	13 1 13	13 2 12	30.0	3074.02234
23 0 23	23 1 22	79.3	3060.36086	13 1 13	14 0 14	4.4	3070.94178
23 0 23	24 1 24	37.3	3053.84760	13 1 12	13 0 13	9.2	3107.58023
24 0 24	23 1 23	32.5	3131.41832	13 1 12	13 2 11	2.9	3082.62160
24 0 24	25 1 25	41.8	3052.18237	13 1 12	14 2 13	11.3	3063.50463
25 0 25	24 1 24	37.4	3132.90933	14 1 14	13 0 13	1.9	3116.90778
25 0 25	26 1 26	47.7	3050.51224	14 1 14	14 2 13	19.7	3072.83240
26 0 26	25 1 25	12.4	3134.39269	14 1 14	15 0 15	2.4	3069.17427
26 0 26	27 1 27	54.1	3048.83736	15 1 15	14 0 14	5.0	3118.30589
27 0 27	26 1 26	47.6	3135.87380	15 1 15	16 0 16	6.5	3067.43237
27 0 27	28 1 28	54.3	3047.15835	15 1 15	16 2 14	55.2	3034.87322
28 0 28	27 1 27	26.9	3137.38512	15 1 14	15 0 15	13.5	3111.03203
28 0 28	29 1 29	94.5	3045.51321	15 1 14	15 2 13	4.4	3081.24805
29 0 29	28 1 28	60.6	3137.61941	15 1 14	16 2 15	10.9	3061.55018
29 0 29	30 1 30	88.4	3042.59166	16 1 16	15 0 15	2.0	3119.72663
				16 1 16	16 2 15	25.6	3070.24528
				16 1 16	17 0 17	3.0	3065.70920
				16 1 15	16 0 16	29.0	3112.79546
				16 1 15	16 2 14	13.0	3080.23697
				16 1 15	17 2 16	23.0	3060.48810
				18 1 18	17 0 17	2.0	3122.62024
				18 1 18	18 2 17	36.9	3067.42024
				18 1 18	19 0 19	3.1	3062.30666
				19 1 19	18 0 18	6.4	3124.08496
				19 1 19	19 2 18	53.4	3065.93403
				19 1 19	20 0 20	12.6	3060.61854
				19 1 18	19 0 19	89.0	3119.75577
				19 1 18	19 2 17	26.7	3077.70156
				19 1 18	20 2 19	62.5	3058.60626
				20 1 19	20 0 20	49.9	3119.87136
				20 1 19	19 2 18	24.4	3125.18678

				20 1 19	20 2 18	35.6	3074.35010
2 2 0	1 1 1	11.3	3108.80826	3 3 0	2 2 1	22.1	3119.45202
2 2 0	2 1 1	17.3	3105.00525	3 3 0	3 2 1	1.0	3114.19828
2 2 1	1 1 0	48.3	3109.14454	3 3 1	2 2 0	22.1	3119.45202
2 2 1	2 1 2	64.5	3105.97150	4 3 1	3 2 2	22.4	3120.64482
3 2 1	2 1 2	96.5	3110.75698	4 3 1	5 4 2	5.1	3057.04706
3 2 2	2 1 1	45.0	3110.71622	4 3 2	3 2 1	11.6	3120.62097
3 2 2	3 1 3	47.6	3106.19590	4 3 2	4 2 3	8.6	3113.67228
4 2 2	3 1 3	8.6	3113.67228	4 3 2	5 4 1	5.1	3057.04706
4 2 2	4 1 3	79.8	3105.44822	5 3 2	4 2 3	10.1	3122.38253
4 2 2	3 3 1	32.8	3081.25931	5 3 2	5 2 3	15.2	3113.51295
4 2 3	3 1 2	41.3	3112.20355	5 3 2	6 4 3	5.5	3055.27932
4 2 3	4 1 4	39.7	3106.49599	5 3 3	4 2 2	19.8	3122.31083
4 2 3	4 3 2	51.3	3073.75073	5 3 3	5 2 4	8.6	3113.67228
5 2 3	4 1 4	45.4	3115.33995	5 3 3	6 4 2	5.5	3055.27932
5 2 3	5 1 4	25.7	3104.67581	6 3 3	5 2 4	21.0	3124.13274
5 2 3	4 3 2	87.7	3082.59513	6 3 3	6 2 4	16.3	3113.37150
5 2 4	4 1 3	19.4	3113.71712	6 3 3	7 4 4	13.2	3053.50572
5 2 4	5 1 5	96.8	3106.98312	6 3 4	5 2 3	4.9	3123.96316
6 2 4	5 1 5	47.2	3117.60288	6 3 4	6 2 5	8.2	3113.68365
6 2 4	6 1 5	17.9	3104.35025	6 3 4	7 4 3	13.2	3053.50572
6 2 5	5 1 4	35.0	3114.92880	7 3 4	6 2 5	8.5	3125.90420
6 2 5	6 1 6	30.8	3107.33059	7 3 4	7 2 5	8.6	3113.16751
6 2 5	6 3 4	39.2	3073.63007	7 3 4	8 4 5	15.7	3051.74614
7 2 5	6 1 6	44.1	3120.02816	7 3 5	6 2 4	21.0	3125.56707
7 2 5	7 1 6	14.8	3104.04172	7 3 5	7 2 6	19.4	3113.71712
7 2 5	6 3 4	78.6	3086.32812	7 3 5	8 4 4	26.8	3051.72818
7 2 6	6 1 5	27.7	3116.17000	8 3 5	7 2 6	32.1	3127.66867
7 2 6	7 1 7	3.9	3107.86835	8 3 5	9 4 6	16.8	3049.94581
7 2 6	7 3 5	34.2	3073.52796	8 3 6	7 2 5	10.6	3127.10219
8 2 6	7 1 7	46.2	3122.63904	8 3 6	8 2 7	7.4	3113.77725
8 2 6	8 1 7	11.9	3103.77843	8 3 6	9 4 5	16.8	3049.94581
8 2 6	7 3 5	73.5	3088.30057	9 3 6	8 2 7	12.0	3129.55765
8 2 7	7 1 6	30.4	3117.33403	9 3 6	9 2 7	6.1	3112.53042
8 2 7	8 1 8	27.4	3108.48369	9 3 6	10 4 7	16.9	3048.23839
8 2 7	8 3 6	28.6	3073.38887	9 3 7	8 2 6	21.6	3128.55412
9 2 7	8 1 8	56.8	3125.45652	9 3 7	9 2 8	14.1	3113.87271
9 2 7	9 1 8	9.9	3103.58757	9 3 7	10 4 6	21.9	3048.15808
9 2 7	8 3 6	69.7	3090.36183	10 3 8	9 2 7	11.5	3129.90904
9 2 8	8 1 7	19.9	3118.42576	10 3 8	10 2 9	5.4	3114.01035
9 2 8	9 1 9	27.2	3109.18079	10 3 8	11 4 7	19.8	3046.35956
9 2 8	9 3 7	28.7	3073.20558	11 3 8	10 2 9	14.1	3133.46286
10 2 8	9 1 9	55.1	3128.49473	11 3 8	11 2 9	4.6	3111.58361
10 2 8	10 1 9	8.5	3103.49440	11 3 8	12 4 9	21.6	3044.81029
10 2 8	9 3 7	55.2	3092.51883	11 3 9	10 2 8	24.5	3131.15801
10 2 9	9 1 8	22.1	3119.45202	11 3 9	11 2 10	1.0	3114.19828

10 2 9	10 1 10	27.6	3109.95757	11 3 9	12 4 8	34.7	3044.54848
10 2 9	10 3 8	28.2	3072.97069	12 3 9	11 2 10	27.7	3135.55936
11 2 9	10 1 10	68.5	3131.76370	12 3 9	12 2 10	10.0	3111.02113
11 2 9	11 1 10	7.7	3103.52051	12 3 9	13 4 10	37.3	3043.15218
11 2 9	10 3 8	65.6	3094.77665	12 3 10	11 2 9	14.1	3132.29598
11 2 10	10 1 9	27.3	3120.42009	12 3 10	12 2 11	5.6	3114.44294
11 2 10	11 1 11	28.5	3110.81272	12 3 10	13 4 9	24.3	3042.71793
11 2 10	11 3 9	27.5	3072.67705	13 3 10	12 2 11	20.0	3137.78236
12 2 10	11 1 11	73.0	3135.26753	13 3 10	13 2 11	4.0	3110.42798
12 2 10	12 1 11	8.8	3103.68573	13 3 10	14 4 11	26.0	3041.54918
12 2 11	11 1 10	25.9	3121.34125	13 3 11	12 2 10	27.4	3133.32372
12 2 11	12 1 12	28.8	3111.74374	13 3 11	13 2 12	13.7	3114.75092
12 2 11	12 3 10	27.0	3072.31780	13 3 11	14 4 10	30.6	3040.85959
13 2 11	12 1 12	90.2	3138.98831	14 3 11	13 2 12	38.2	3140.15853
13 2 11	13 1 12	37.5	3103.99012	14 3 11	14 2 12	8.2	3109.83445
13 2 11	13 3 10	52.5	3076.15134	14 3 11	15 4 12	43.7	3040.01665
13 2 12	12 1 11	19.4	3122.22809	14 3 12	13 2 11	18.7	3134.24279
13 2 12	13 1 13	32.5	3112.74743	14 3 12	14 2 13	7.3	3115.12513
13 2 12	13 3 11	28.9	3071.88696	14 3 12	15 4 11	33.6	3038.96205
14 2 12	13 1 13	82.5	3142.96728	15 3 12	14 2 13	29.2	3142.71353
14 2 12	13 3 11	56.5	3102.10723	15 3 12	15 2 13	4.2	3109.27148
14 2 13	14 1 13	10.9	3104.49445	15 3 12	16 4 13	34.1	3038.57000
14 2 13	13 1 12	16.5	3123.09528	15 3 13	14 2 12	28.6	3135.06788
14 2 13	14 1 14	24.3	3113.81948	15 3 13	15 2 14	17.4	3115.57743
				15 3 13	16 4 12	43.1	3037.01725
4 4 0	3 3 1	7.5	3128.60843	5 5 0	4 4 1	1.9	3138.36927
4 4 0	4 3 1	35.3	3121.62408	5 5 0	5 4 1	39.9	3129.64171
4 4 0	5 5 1	13.9	3049.08104	5 5 0	6 6 1	8.6	3039.43189
4 4 1	3 3 0	7.5	3128.60843	5 5 1	4 4 0	1.9	3138.36927
4 4 1	4 3 2	35.3	3121.62408	5 5 1	5 4 2	39.9	3129.64171
4 4 1	5 5 0	13.9	3049.08104	5 5 1	6 6 0	8.6	3039.43189
5 4 1	4 3 2	8.1	3130.32380	6 5 1	5 4 2	1.7	3140.07264
5 4 1	5 3 2	14.9	3121.58874	6 5 1	6 4 2	20.8	3129.59647
5 4 1	6 5 2	15.1	3047.30948	6 5 1	7 6 2	8.9	3037.64936
5 4 2	4 3 1	8.1	3130.32380	6 5 2	5 4 1	1.7	3140.07264
5 4 2	5 3 1	14.9	3121.58874	6 5 2	6 4 3	20.8	3129.59647
5 4 2	6 5 1	15.1	3047.30948	6 5 2	7 6 1	8.9	3037.64936
6 4 2	5 3 3	9.8	3132.03203	7 5 2	7 4 3	12.7	3129.54233
6 4 2	7 5 3	12.4	3045.53311	7 5 2	8 6 3	3.8	3035.86231
6 4 3	5 3 2	9.8	3132.03203	7 5 3	6 4 2	1.8	3141.76907
6 4 3	7 5 2	12.4	3045.53311	7 5 3	7 4 4	12.7	3129.54233
7 4 3	6 3 4	22.7	3133.73530	7 5 3	8 6 2	3.8	3035.86231
7 4 3	8 5 4	17.8	3043.75247	8 5 3	7 4 4	2.7	3143.45778
7 4 4	6 3 3	22.7	3133.73530	8 5 3	8 4 4	8.5	3129.47892
7 4 4	8 5 3	17.8	3043.75247	8 5 3	9 6 4	10.1	3034.06866
8 4 4	7 3 5	28.1	3135.43244	8 5 4	7 4 3	2.7	3143.45778

8 4 4	8 3 5	31.9	3121.40006	8 5 4	8 4 5	8.5	3129.47892
8 4 4	9 5 5	17.9	3041.96900	8 5 4	9 6 3	10.1	3034.06866
8 4 5	7 3 4	28.1	3135.41395	9 5 4	8 4 5	2.5	3145.13860
8 4 5	8 3 6	32.2	3121.43876	9 5 4	10 6 5	8.8	3032.27170
8 4 5	9 5 4	17.9	3041.96900	9 5 5	8 4 4	2.5	3145.13860
9 4 5	8 3 6	28.0	3137.08258	9 5 5	10 6 4	8.8	3032.27170
9 4 5	9 3 6	30.0	3121.37268	10 5 5	9 4 6	3.2	3146.81058
9 4 5	10 5 6	21.2	3040.18293	10 5 5	11 6 6	10.8	3030.47071
9 4 6	8 3 5	28.0	3137.08258	10 5 6	9 4 5	3.2	3146.81058
9 4 6	9 3 7	30.0	3121.37268	10 5 6	11 6 5	10.8	3030.47071
9 4 6	10 5 5	21.2	3040.18293				
11 4 7	10 3 8	30.8	3140.50061				
11 4 7	11 3 8	8.7	3120.98915				
11 4 7	12 5 8	49.2	3036.61566				
11 4 8	10 3 7	30.6	3140.34591				
11 4 8	12 5 7	48.7	3036.60432				
12 4 8	11 3 9	25.0	3142.18923				
12 4 8	12 3 9	22.9	3120.76419				
12 4 8	13 5 9	40.6	3034.83224				
12 4 9	11 3 8	33.0	3141.92333				
12 4 9	12 3 10	22.9	3120.76419				
12 4 9	13 5 8	51.1	3034.81375				
13 4 9	12 3 10	35.2	3143.89001				
13 4 9	13 3 10	26.1	3120.47884				
13 4 9	14 5 10	52.7	3033.05608				
13 4 10	12 3 9	35.2	3143.89001				
13 4 10	13 3 11	26.1	3120.47884				
13 4 10	14 5 9	52.7	3033.05608				
14 4 10	13 3 11	38.3	3145.60869				
14 4 10	14 3 11	23.2	3120.12216				
14 4 10	15 5 11	55.2	3031.28957				
14 4 11	14 3 12	23.2	3120.12216				
14 4 11	15 5 10	55.2	3031.28957				
15 4 11	14 3 12	42.1	3147.35615				
15 4 11	15 3 12	28.4	3119.68368				
15 4 11	16 5 12	59.1	3029.53769				
15 4 12	14 3 11	41.3	3146.29351				
15 4 12	15 3 12	28.4	3119.68368				
15 4 12	16 5 11	36.6	3029.43745				
6 6 0	5 5 1	8.7	3148.30630	7 7 0	6 6 1	10.8	3158.60100
6 6 0	6 5 1	68.8	3137.83421	7 7 0	7 6 1	72.3	3146.38732
6 6 0	7 7 1	28.7	3029.98122	7 7 0	8 8 1	36.7	3020.91887

6 6 1	5 5 0	8.7	3148.30630	7 7 1	6 6 0	10.8	3158.60100
6 6 1	6 5 2	68.8	3137.83421	7 7 1	7 6 2	72.3	3146.38732
6 6 1	7 7 0	28.7	3029.98122	7 7 1	8 8 0	36.7	3020.91887
7 6 1	6 5 2	12.4	3149.98333	8 7 1	7 6 2	11.2	3160.22655
7 6 1	7 5 2	51.6	3137.76447	8 7 1	8 6 2	55.2	3146.26592
7 6 1	8 7 2	32.5	3028.17522	8 7 1	9 8 2	38.6	3019.06207
7 6 2	6 5 1	12.4	3149.98333	8 7 2	7 6 1	11.2	3160.22655
7 6 2	7 5 3	51.6	3137.76447	8 7 2	8 6 3	55.2	3146.26592
7 6 2	8 7 1	32.5	3028.17522	8 7 2	9 8 1	38.6	3019.06207
8 6 2	7 5 3	13.6	3151.65252	9 7 2	8 6 3	12.0	3161.84051
8 6 2	9 7 3	35.8	3026.36159	9 7 2	9 6 3	44.3	3146.13217
8 6 3	7 5 2	13.6	3151.65252	9 7 2	10 8 3	41.4	3017.19537
8 6 3	9 7 2	35.8	3026.36159	9 7 3	8 6 2	12.0	3161.84051
9 6 3	8 5 4	14.0	3153.31290	9 7 3	9 6 4	44.3	3146.13217
9 6 3	9 5 4	15.5	3137.59463	9 7 3	10 8 2	41.4	3017.19537
9 6 3	10 7 4	36.8	3024.54161	10 7 3	9 6 4	11.9	3163.44386
9 6 4	8 5 3	14.0	3153.31292	10 7 3	10 6 4	36.8	3145.98705
9 6 4	9 5 5	15.5	3137.59463	10 7 3	11 8 4	40.6	3015.32023
9 6 4	10 7 3	36.8	3024.54161	10 7 4	9 6 3	11.9	3163.44386
10 6 4	9 5 5	14.8	3154.96476	10 7 4	10 6 5	36.8	3145.98705
10 6 4	10 5 5	26.0	3137.49513	10 7 4	11 8 3	40.6	3015.32023
10 6 4	11 7 5	27.0	3022.71587	11 7 4	10 6 5	12.4	3165.03769
10 6 5	9 5 4	14.8	3154.96476	11 7 4	11 6 5	32.6	3145.83083
10 6 5	10 5 6	26.0	3137.49513	11 7 4	12 8 5	44.2	3013.43705
10 6 5	11 7 4	27.0	3022.71587	11 7 5	10 6 4	12.4	3165.03769
11 6 5	10 5 6	15.9	3156.60784	11 7 5	11 6 6	32.6	3145.83083
11 6 5	11 5 6	26.9	3137.38512	11 7 5	12 8 4	44.2	3013.43705
11 6 5	12 7 6	42.3	3020.88392	12 7 5	11 6 6	14.0	3166.62235
11 6 6	10 5 5	15.9	3156.60784	12 7 5	12 6 6	19.4	3145.66425
11 6 6	11 5 7	26.9	3137.38512	12 7 6	11 6 5	14.0	3166.62235
11 6 6	12 7 5	42.3	3020.88392	12 7 6	12 6 7	19.4	3145.66425
12 6 6	11 5 7	16.9	3158.24238	13 7 6	12 6 7	15.4	3168.19919
12 6 6	12 5 7	24.0	3137.26446	13 7 6	13 6 7	26.5	3145.48972
12 6 6	13 7 7	44.1	3019.04817	13 7 6	14 8 7	46.8	3009.65477
12 6 7	11 5 6	16.9	3158.24238	13 7 7	12 6 6	15.4	3168.19919
12 6 7	12 5 8	24.0	3137.26446	13 7 7	13 6 8	26.5	3145.48972
12 6 7	13 7 6	44.1	3019.04817	13 7 7	14 8 6	46.8	3009.65477
13 6 7	12 5 8	18.6	3159.86829	14 7 7	13 6 8	15.2	3169.76926
13 6 7	13 5 8	24.6	3137.13329	14 7 7	14 6 8	25.4	3145.30610
13 6 7	14 7 8	50.1	3017.20943	14 7 7	15 8 8	49.5	3007.75834
13 6 8	12 5 7	18.6	3159.86829	14 7 8	13 6 7	15.2	3169.76926
13 6 8	13 5 7	24.6	3137.13329	14 7 8	14 6 7	25.4	3145.30610
13 6 8	14 7 9	50.1	3017.20943	14 7 8	15 8 9	49.5	3007.75834
14 6 8	14 5 9	25.7	3136.99126	15 7 8	14 6 9	18.2	3171.33238
14 6 8	15 7 9	53.0	3015.36809	15 7 8	15 6 9	24.6	3145.11470
14 6 9	14 5 8	25.7	3136.99126	15 7 8	16 8 9	53.4	3005.86018
14 6 9	15 7 10	53.0	3015.36809	15 7 9	14 6 8	18.2	3171.33238

				15 7 9	15 6 8	24.6	3145.11470
				15 7 9	16 8 10	53.4	3005.86018
				16 7 9	15 6 10	19.5	3172.88995
				16 7 9	16 6 10	15.0	3144.91428
				16 7 9	17 8 10	55.6	3003.96165
				16 7 10	15 6 9	19.5	3172.88995
				16 7 10	16 6 9	15.0	3144.91428
				16 7 10	17 8 11	55.6	3003.96165
				17 7 10	16 6 11	21.8	3174.44231
				17 7 10	17 6 11	24.5	3144.71014
				17 7 10	18 8 11	57.1	3002.06429
				17 7 11	16 6 10	21.8	3174.44231
				17 7 11	17 6 10	24.5	3144.71014
				17 7 11	18 8 12	57.1	3002.06429
				18 7 11	17 6 12	24.3	3175.98967
				18 7 11	18 6 12	26.1	3144.49771
				18 7 11	19 8 12	60.6	3000.16919
				18 7 12	17 6 11	24.3	3175.98967
				18 7 12	18 6 11	26.1	3144.49771
				18 7 12	19 8 13	60.6	3000.16919
				19 7 12	18 6 13	23.1	3177.53228
				19 7 12	19 6 13	28.4	3144.27845
				19 7 12	20 8 13	5.6	2998.26729
				19 7 13	18 6 12	23.1	3177.53228
				19 7 13	19 6 12	28.4	3144.27845
				19 7 13	20 8 14	5.6	2998.26729
				20 7 13	19 6 14	31.1	3179.07001
				20 7 13	20 6 14	31.2	3144.05316
				20 7 13	21 8 14	68.2	2996.38957
				20 7 14	19 6 13	31.1	3179.07001
				20 7 14	20 6 13	31.2	3144.05316
				20 7 14	21 8 15	68.2	2996.38957
				9 9 0	8 8 1	4.6	3173.48608
				9 9 0	9 8 1	67.6	3157.79032
				9 9 0	10 10 1	29.1	2997.18984
				9 9 1	8 8 1	4.6	3173.48608
				9 9 1	9 8 1	67.6	3157.79032
				9 9 1	10 10 1	29.1	2997.18984
				10 9 1	9 8 2	5.4	3175.19362
				10 9 1	10 8 2	50.7	3157.75244

				10 9 1	11 10 2	36.1	2995.42026
				11 9 2	10 8 3	5.2	3176.89704
				11 9 2	11 8 3	42.5	3157.71032
				11 9 2	12 10 3	6.6	2993.64910
				12 9 3	11 8 4	7.3	3178.59716
				12 9 3	12 8 4	37.0	3157.66378
				12 9 3	13 10 4	43.0	2991.87459
				12 9 4	11 8 4	7.3	3178.59716
				12 9 4	12 8 4	37.0	3157.66378
				12 9 4	13 10 4	43.0	2991.87459
				13 9 4	12 8 5	6.6	3180.29359
				13 9 4	13 8 5	33.9	3157.61271
				13 9 4	14 10 5	47.3	2990.09887
				13 9 5	12 8 5	6.6	3180.29359
				13 9 5	13 8 4	33.9	3157.61271
				13 9 5	14 10 6	47.3	2990.09887
				14 9 5	13 8 6	11.0	3181.98473
				14 9 5	14 8 6	31.6	3157.55701
				14 9 5	15 10 6	49.8	2988.32134
				14 9 6	13 8 5	11.0	3181.98473
				14 9 6	14 8 5	31.6	3157.55701
				14 9 6	15 10 7	49.8	2988.32134
				15 9 6	14 8 7	13.7	3183.67222
				15 9 6	15 8 7	32.6	3157.49646
				15 9 6	16 10 7	56.4	2986.54230
				15 9 7	14 8 6	13.7	3183.67222
				15 9 7	15 8 6	32.6	3157.49646
				15 9 7	16 10 8	56.4	2986.54230
				16 9 7	15 8 8	17.5	3185.35528
				16 9 7	16 8 8	33.9	3157.43091
				16 9 7	17 10 8	60.8	2984.76195
				16 9 8	15 8 7	17.5	3185.35528
				16 9 8	16 8 7	33.9	3157.43091
				16 9 8	17 10 9	60.8	2984.76195
				17 9 8	16 8 9	18.9	3187.03404
				17 9 8	17 8 9	35.0	3157.36010
				17 9 8	18 10 9	64.0	2982.98051
				17 9 9	16 8 10	18.9	3187.03404
				17 9 9	17 8 8	35.0	3157.36010
				17 9 9	18 10 10	64.0	2982.98051

				18 9 9	17 8 10	26.1	3188.70779
				18 9 9	18 8 10	37.7	3157.28397
				18 9 9	19 10 10	69.7	2981.19822
				18 9 10	17 8 9	26.1	3188.70779
				18 9 10	18 8 9	37.7	3157.28397
				18 9 10	19 10 11	69.7	2981.19822
				19 9 10	18 8 11	30.4	3190.37684
				19 9 10	19 8 11	40.8	3157.20216
				19 9 10	20 10 11	72.7	2979.41520
				19 9 11	18 8 10	30.4	3190.37684
				19 9 11	19 8 10	40.8	3157.20216
				19 9 11	20 10 12	72.7	2979.41520
				20 9 11	19 8 12	35.4	3192.04082
				20 9 11	20 8 12	44.3	3157.11441
				20 9 11	21 10 12	76.3	2977.63200
				20 9 12	19 8 11	35.4	3192.04082
				20 9 12	20 8 11	44.3	3157.11441
				20 9 12	21 10 13	76.3	2977.63200
				21 9 12	20 8 13	39.8	3193.69936
				21 9 12	21 8 13	48.4	3157.02046
				21 9 12	22 10 13	79.4	2975.84846
				21 9 13	20 8 12	39.8	3193.69936
				21 9 13	21 8 12	48.4	3157.02046
				21 9 13	22 10 14	79.4	2975.84846
				22 9 13	21 8 14	47.0	3195.35226
				22 9 13	22 8 14	52.8	3156.91982
				22 9 13	23 10 14	83.4	2974.06475
				22 9 14	21 8 13	47.0	3195.35226
				22 9 14	22 8 13	52.8	3156.91982
				22 9 14	23 10 15	83.4	2974.06475
				23 9 14	22 8 15	53.1	3196.99896
				23 9 14	23 8 15	57.1	3156.81207
				23 9 14	24 10 15	86.8	2972.28131
				23 9 15	22 8 14	53.1	3196.99896
				23 9 15	23 8 14	57.1	3156.81207
				23 9 15	24 10 16	86.8	2972.28131
				24 9 15	23 8 16	59.0	3198.63879
				24 9 15	24 8 16	61.7	3156.69643
				24 9 16	23 8 15	59.0	3198.63879
				24 9 16	24 8 15	61.7	3156.69643

				25 9 16	24 8 17	64.3	3200.27078
				25 9 16	26 10 17	91.5	2968.71380
				25 9 17	24 8 16	64.3	3200.27078
				25 9 17	26 10 18	91.5	2968.71380
				26 9 17	25 8 18	70.1	3201.89376
				26 9 17	26 8 18	68.3	3156.43672
				26 9 17	27 10 18	93.1	2966.92881
				26 9 18	25 8 17	70.1	3201.89376
				26 9 18	26 8 17	68.3	3156.43672
				26 9 18	27 10 19	93.1	2966.92881
				27 9 18	27 8 19	73.0	3156.24017
				27 9 19	27 8 20	73.0	3156.24017
				28 9 19	27 8 20	80.0	3205.10181
				28 9 19	28 8 20	79.6	3156.12652
				28 9 19	29 10 20	95.9	2963.34820
				28 9 20	27 8 19	80.0	3205.10181
				28 9 20	28 8 19	79.6	3156.12652
				28 9 20	29 10 21	95.9	2963.34820
				29 9 20	28 8 21	83.3	3206.67517
				29 9 20	29 8 21	83.4	3155.93834
				29 9 20	30 10 21	95.6	2961.54169
				29 9 21	28 8 20	83.3	3206.67517
				29 9 21	29 8 20	83.4	3155.93834
				29 9 21	30 10 22	95.6	2961.54169
				30 9 21	29 8 22	88.1	3208.20862
				30 9 21	30 8 22	86.6	3155.70920
				30 9 21	31 10 22	98.6	2959.70665
				30 9 22	29 8 21	88.1	3208.20862
				30 9 22	30 8 21	86.6	3155.70920
				30 9 22	31 10 23	98.6	2959.70665
				31 9 22	30 8 23	92.5	3209.66106
				31 9 22	31 8 23	91.4	3155.39741
				31 9 22	32 10 23	99.4	2957.80160
				31 9 23	30 8 22	92.5	3209.66106
				31 9 23	31 8 22	91.4	3155.39741
				31 9 23	32 10 24	99.4	2957.80160
11 10 1	10 9 2	21.7	3184.56735	11 11 0	10 10 1	13.8	3192.10336
11 10 1	11 9 2	75.0	3165.38751	11 11 0	11 10 1	83.1	3172.93037
11 10 1	12 11 2	65.4	2985.54974	11 11 0	12 12 1	60.8	2977.35862
11 10 2	10 9 1	21.7	3184.56735	11 11 1	10 10 1	13.8	3192.10336
11 10 2	11 9 1	75.0	3165.38751	11 11 1	11 10 0	83.1	3172.93037

11 10 2	12 11 3	65.4	2985.54974	11 11 1	12 12 2	60.8	2977.35862
12 10 2	11 9 3	24.9	3186.25545	12 11 1	11 10 2	15.8	3193.79132
12 10 2	12 9 3	68.8	3165.33068	12 11 1	12 10 2	73.2	3172.87452
12 10 2	13 11 3	68.5	2983.76546	12 11 1	13 12 2	63.8	2975.57593
12 10 3	11 9 2	24.9	3186.25545	12 11 2	11 10 3	15.8	3193.79132
12 10 3	12 9 2	68.8	3165.33068	12 11 2	12 10 1	73.2	3172.87452
12 10 3	13 11 4	68.5	2983.76546	12 11 2	13 12 3	63.8	2975.57593
13 10 3	12 9 4	28.0	3187.93837	13 11 2	12 10 3	18.7	3195.47420
13 10 3	13 9 4	63.4	3165.26846	13 11 2	13 10 3	66.1	3172.81328
13 10 3	14 11 4	71.8	2981.97793	13 11 2	14 12 3	66.4	2973.78987
13 10 4	12 9 3	28.0	3187.93837	13 11 3	12 10 3	18.7	3195.47420
13 10 4	13 9 3	63.4	3165.26846	13 11 3	13 10 2	66.1	3172.81328
13 10 4	14 11 5	71.8	2981.97793	13 11 3	14 12 4	66.4	2973.78987
14 10 4	13 9 5	31.7	3189.61589	14 11 4	13 10 3	21.4	3197.15191
14 10 4	14 9 5	62.8	3165.20023	14 11 4	14 10 5	61.0	3172.74711
14 10 4	15 11 5	71.8	2980.18734	14 11 4	15 12 3	70.6	2972.00063
14 10 5	13 9 4	31.7	3189.61589	14 11 3	13 10 4	21.4	3197.15191
14 10 5	14 9 4	62.8	3165.20023	14 11 3	14 10 4	61.0	3172.74711
14 10 5	15 11 6	71.8	2980.18734	14 11 3	15 12 4	70.6	2972.00063
15 10 5	14 9 6	35.3	3191.28795	15 11 4	14 10 5	23.5	3198.82425
15 10 5	16 11 6	76.7	2978.39312	15 11 4	15 10 5	60.3	3172.67468
15 10 6	14 9 5	35.3	3191.28795	15 11 5	14 10 4	23.5	3198.82425
15 10 6	16 11 7	76.7	2978.39312	15 11 5	15 10 6	60.3	3172.67468
16 10 6	15 9 7	39.4	3192.95410	16 11 5	15 10 6	29.5	3200.49098
16 10 6	17 11 7	78.7	2976.59585	16 11 5	16 10 6	38.1	3172.59830
16 10 7	15 9 6	39.4	3192.95410	16 11 5	17 12 6	77.6	2968.41250
16 10 7	17 11 8	78.7	2976.59585	16 11 6	15 10 5	29.5	3200.49098
17 10 7	16 9 8	43.6	3194.61438	16 11 6	16 10 7	38.1	3172.59830
17 10 7	17 9 8	62.9	3164.95935	16 11 6	17 12 5	77.6	2968.41250
17 10 8	16 9 7	43.6	3194.61438	17 11 7	16 10 6	33.7	3202.15199
17 10 8	17 9 7	62.9	3164.95935	17 11 7	17 10 8	59.1	3172.51322
18 10 8	17 9 9	47.8	3196.26833	17 11 7	18 12 6	79.9	2966.61370
18 10 8	18 9 9	64.2	3164.86598	17 11 6	16 10 7	33.7	3202.15199
18 10 9	17 9 8	47.8	3196.26833	17 11 6	17 10 7	59.1	3172.51322
18 10 9	18 9 8	64.2	3164.86598	17 11 6	18 12 7	79.9	2966.61370
19 10 9	18 9 10	53.0	3197.91557	18 11 7	17 10 8	38.6	3203.80702
19 10 9	19 9 10	61.8	3164.76472	18 11 7	18 10 8	61.6	3172.42265
19 10 9	20 11 10	87.2	2971.18547	18 11 7	19 12 8	82.8	2964.81164
19 10 10	18 9 9	53.0	3197.91557	18 11 8	17 10 7	38.6	3203.80702
19 10 10	19 9 9	61.8	3164.76472	18 11 8	18 10 9	61.6	3172.42265
19 10 10	20 11 11	87.2	2971.18547	18 11 8	19 12 7	82.8	2964.81164
20 10 10	19 9 11	57.9	3199.55597	19 11 8	18 10 9	43.8	3205.45586
20 10 10	20 9 11	68.5	3164.65741	19 11 8	19 10 9	63.2	3172.32587
20 10 10	21 11 11	90.0	2969.37559	19 11 8	20 12 9	84.6	2963.00650
20 10 11	19 9 10	57.9	3199.55597	19 11 9	18 10 8	43.8	3205.45586
20 10 11	20 9 10	68.5	3164.65741	19 11 9	19 10 10	63.2	3172.32587
20 10 11	21 11 12	90.0	2969.37559	19 11 9	20 12 8	84.6	2963.00650

21 10 11	20 9 12	62.8	3201.18899	20 11 9	19 10 10	49.1	3207.09815
21 10 11	21 9 12	71.7	3164.54159	20 11 9	20 10 10	65.3	3172.22233
21 10 11	22 11 12	91.5	2967.56275	20 11 9	21 12 10	86.3	2961.19792
21 10 12	20 9 11	62.8	3201.18899	20 11 10	19 10 9	49.1	3207.09815
21 10 12	21 9 11	71.7	3164.54159	20 11 10	20 10 11	65.3	3172.22233
21 10 12	22 11 13	91.5	2967.56275	20 11 10	21 12 9	86.3	2961.19792
22 10 12	21 9 13	66.8	3202.81418	21 11 10	20 10 11	54.6	3208.73362
22 10 12	22 9 13	73.9	3164.41737	21 11 10	21 10 11	68.5	3172.11161
22 10 12	23 11 13	92.7	2965.74621	21 11 10	22 12 11	89.4	2959.38601
22 10 13	21 9 12	66.8	3202.81418	21 11 11	20 10 10	54.6	3208.73362
22 10 13	22 9 12	73.9	3164.41737	21 11 11	21 10 12	68.5	3172.11161
22 10 13	23 11 14	92.7	2965.74621	21 11 11	22 12 10	89.4	2959.38601
23 10 13	22 9 14	72.0	3204.43100	22 11 11	21 10 12	60.0	3210.36182
23 10 13	23 9 14	76.5	3164.28402	22 11 11	22 10 12	71.0	3171.99330
23 10 13	24 11 14	94.0	2963.92638	22 11 11	23 12 12	91.1	2957.57078
23 10 14	22 9 13	72.0	3204.43100	22 11 12	21 10 11	60.0	3210.36182
23 10 14	23 9 15	76.5	3164.28402	22 11 12	22 10 13	71.0	3171.99330
23 10 14	24 11 13	94.0	2963.92638	22 11 12	23 12 11	91.1	2957.57078
24 10 14	23 9 15	76.1	3206.03859	23 11 12	22 10 13	64.9	3211.98234
24 10 14	24 9 15	79.2	3164.14089	23 11 12	23 10 13	70.7	3171.86750
24 10 14	25 11 15	94.8	2962.10311	23 11 12	24 12 13	92.9	2955.75208
24 10 15	23 9 14	76.1	3206.03859	23 11 13	22 10 12	64.9	3211.98234
24 10 15	24 9 16	79.2	3164.14089	23 11 13	23 10 14	70.7	3171.86750
24 10 15	25 11 14	94.8	2962.10311	23 11 13	24 12 12	92.9	2955.75208
25 10 15	24 9 16	79.9	3207.63593	24 11 13	23 10 14	69.8	3213.59471
25 10 15	25 9 16	79.1	3163.98708	24 11 13	24 10 14	76.7	3171.73196
25 10 15	26 11 16	95.9	2960.27453	24 11 13	25 12 14	92.3	2953.93049
25 10 16	24 9 15	79.9	3207.63593	24 11 14	23 10 13	69.8	3213.59471
25 10 16	25 9 17	79.1	3163.98708	24 11 14	24 10 15	76.7	3171.73196
25 10 16	26 11 15	95.9	2960.27453	24 11 14	25 12 13	92.3	2953.93049
26 10 16	25 9 17	83.5	3209.22041	25 11 15	24 10 14	74.3	3215.19817
26 10 16	26 9 17	85.1	3163.81918	25 11 15	25 10 16	80.2	3171.58788
26 10 17	25 9 16	83.5	3209.22041	25 11 14	24 10 15	74.3	3215.19817
26 10 17	26 9 18	85.1	3163.81918	25 11 14	25 10 15	80.2	3171.58788
				26 11 16	25 10 15	78.8	3216.79210
				26 11 16	26 10 17	81.5	3171.43349
				26 11 15	25 10 16	78.8	3216.79210
				26 11 15	26 10 16	81.5	3171.43349
				27 11 17	26 10 16	82.3	3218.37557
				27 11 17	27 10 18	85.4	3171.26874
				27 11 17	28 12 16	97.4	2948.43591
				27 11 16	26 10 17	82.3	3218.37557
				27 11 16	27 10 17	85.4	3171.26874
				27 11 16	28 12 17	97.4	2948.43591
				28 11 18	27 10 17	85.4	3219.94727

				28 11 18	28 10 19	87.5	3171.09149
				28 11 18	29 12 17	97.7	2946.59457
				28 11 17	27 10 18	85.4	3219.94727
				28 11 17	28 10 18	87.5	3171.09146
				28 11 17	29 12 18	97.7	2946.59457
				29 11 18	28 10 19	88.4	3221.50585
				29 11 18	29 10 19	89.4	3170.90067
				29 11 19	28 10 18	88.4	3221.50585
				29 11 19	29 10 20	89.4	3170.90067
				30 11 20	29 10 19	90.7	3223.04934
				30 11 20	30 10 21	91.8	3170.69431
				30 11 19	29 10 20	90.7	3223.04934
				30 11 19	30 10 20	91.8	3170.69431
13 12 1	12 11 2	45.5	3202.88882	13 13 0	12 12 1	39.8	3210.19957
13 12 1	13 11 2	86.6	3180.23691	13 13 0	13 12 1	93.4	3187.55599
13 12 1	14 13 2	84.7	2965.52551	13 13 0	14 14 1	85.4	2957.20684
13 12 2	12 11 1	45.5	3202.88882	13 13 0	12 12 0	39.8	3210.19957
13 12 2	13 11 3	86.6	3180.23691	13 13 0	13 12 1	93.4	3187.55599
13 12 2	14 13 1	84.7	2965.52551	13 13 0	14 14 0	85.4	2957.20684
14 12 2	13 11 3	49.3	3204.56667	14 13 1	13 12 2	43.3	3211.87651
14 12 2	14 11 3	86.0	3180.17132	14 13 1	14 12 2	88.8	3187.49069
14 12 2	15 13 3	85.7	2963.73842	14 13 1	15 14 2	86.4	2955.42066
14 12 3	13 11 2	49.3	3204.56667	14 13 2	13 12 1	43.3	3211.87651
14 12 3	14 11 4	86.0	3180.17132	14 13 2	14 12 3	88.8	3187.49069
14 12 3	15 13 2	85.7	2963.73842	14 13 2	15 14 1	86.4	2955.42066
15 12 3	14 11 4	51.3	3206.23898	15 13 2	14 12 3	47.5	3213.54813
15 12 3	15 11 4	84.3	3180.10077	15 13 2	15 12 3	86.3	3187.42036
15 12 3	16 13 4	88.9	2961.94805	15 13 2	16 14 3	88.4	2953.63128
15 12 4	14 11 3	51.3	3206.23898	15 13 3	14 12 2	47.5	3213.54813
15 12 4	15 11 5	84.3	3180.10077	15 13 3	15 12 4	86.3	3187.42036
15 12 4	16 13 3	88.9	2961.94805	15 13 3	16 14 2	88.4	2953.63128
16 12 4	15 11 5	57.3	3207.90643	16 13 3	15 12 4	51.8	3215.21425
16 12 4	16 11 5	82.4	3180.02472	16 13 3	16 12 4	84.4	3187.34441
16 12 4	17 13 5	91.2	2960.15457	16 13 3	17 14 4	90.3	2951.83855
16 12 5	15 11 4	57.3	3207.90643	16 13 4	15 12 3	51.8	3215.21425
16 12 5	16 11 6	82.4	3180.02472	16 13 4	16 12 5	84.4	3187.34441
16 12 5	17 13 4	91.2	2960.15457	16 13 4	17 14 3	90.3	2951.83855
17 12 5	16 11 6	61.1	3209.56806	17 13 4	16 12 5	55.6	3216.87468
17 12 5	17 11 6	82.8	3179.94294	17 13 4	17 12 5	83.9	3187.26267
17 12 5	18 13 6	91.9	2958.35769	17 13 4	18 14 5	91.7	2950.04229
17 12 6	16 11 5	61.1	3209.56806	17 13 5	16 12 4	55.6	3216.87468
17 12 6	17 11 7	82.8	3179.94294	17 13 5	17 12 6	83.9	3187.26267
17 12 6	18 13 5	91.9	2958.35769	17 13 5	18 14 4	91.7	2950.04229
18 12 6	17 11 7	64.1	3211.22374	18 13 5	17 12 6	59.9	3218.52895
18 12 6	18 11 7	82.8	3179.85522	18 13 5	18 12 6	83.5	3187.17488

18 12 6	19 13 7	93.1	2956.55782	18 13 5	19 14 6	85.5	2948.24334
18 12 7	17 11 6	64.1	3211.22374	18 13 6	17 12 5	59.9	3218.52895
18 12 7	18 11 8	82.8	3179.85522	18 13 6	18 12 7	83.5	3187.17488
18 12 7	19 13 6	93.1	2956.55782	18 13 6	19 14 5	85.5	2948.24334
19 12 7	18 11 8	69.1	3212.87374	19 13 6	18 12 7	64.1	3220.17706
19 12 7	19 11 8	84.0	3179.76139	19 13 6	19 12 7	84.2	3187.08079
19 12 7	19 13 6	95.2	2989.57665	19 13 6	20 14 7	94.0	2946.43915
19 12 8	18 11 7	69.1	3212.87374	19 13 7	18 12 6	64.1	3220.17706
19 12 8	19 11 9	84.0	3179.76139	19 13 7	19 12 8	84.2	3187.08079
19 12 8	19 13 7	95.2	2989.57665	19 13 7	20 14 6	94.0	2946.43915
20 12 8	19 11 9	72.6	3214.51733	20 13 7	19 12 8	68.5	3221.81833
20 12 8	20 11 9	84.3	3179.66110	20 13 7	20 12 8	84.7	3186.97978
20 12 8	20 13 7	96.1	2989.51054	20 13 7	21 14 8	94.8	2944.63193
20 12 9	19 11 8	72.6	3214.51733	20 13 8	19 12 7	68.5	3221.81833
20 12 9	20 11 10	84.3	3179.66110	20 13 8	20 12 9	84.7	3186.97978
20 12 9	20 13 8	96.1	2989.51054	20 13 8	21 14 7	94.8	2944.63193
21 12 9	20 11 10	76.0	3216.15429	21 13 8	20 12 9	72.6	3223.45229
21 12 9	21 11 10	85.9	3179.55394	21 13 8	21 12 9	85.9	3186.87153
21 12 9	21 13 8	92.1	2989.44184	21 13 8	22 14 9	95.2	2942.82041
21 12 10	20 11 9	76.0	3216.15429	21 13 9	20 12 8	72.6	3223.45229
21 12 10	21 11 11	85.9	3179.55394	21 13 9	21 12 10	85.9	3186.87153
21 12 10	21 13 9	92.1	2989.44184	21 13 9	22 14 8	95.2	2942.82041
22 12 10	21 11 11	79.4	3217.78419	22 13 9	21 12 10	76.0	3225.07820
22 12 10	22 11 11	86.9	3179.43968	22 13 9	22 12 10	68.7	2940.99653
22 12 11	21 11 10	79.4	3217.78419	22 13 9	22 14 8	96.0	2981.02649
22 12 11	22 11 12	86.9	3179.43968	22 13 10	21 12 9	76.2	3225.07824
23 12 11	22 11 12	82.1	3219.40670	22 13 10	22 12 11	68.7	2940.99653
23 12 11	22 13 10	96.5	3029.33430	22 13 10	22 14 9	96.0	2981.02649
23 12 11	23 13 10	91.1	2989.28964	23 13 10	22 12 11	80.0	3226.69521
23 12 12	22 11 11	82.1	3219.40670	23 13 10	23 12 11	88.3	3186.62975
23 12 12	23 11 13	88.3	3179.31784	23 13 10	24 14 11	97.4	2939.18129
23 12 12	23 13 11	91.1	2989.28964	23 13 11	22 12 10	80.0	3226.69521
24 12 12	23 11 13	84.9	3221.02113	23 13 11	23 12 12	88.3	3186.62975
24 12 12	24 11 13	90.1	3179.18775	23 13 11	24 14 10	97.4	2939.18129
24 12 12	25 13 13	96.6	2945.68543	24 13 12	23 12 11	83.2	3228.30185
24 12 13	23 11 12	84.9	3221.02113	24 13 12	24 12 13	50.7	3186.49375
24 12 13	24 11 14	90.1	3179.18775	24 13 12	24 14 11	96.6	2980.85381
24 12 13	25 13 12	96.6	2945.68543	24 13 13	23 12 11	83.2	3228.30185
25 12 13	24 11 14	87.6	3222.62687	24 13 13	24 12 13	50.7	3186.49375
25 12 13	25 11 14	91.2	3179.04857	24 13 13	25 14 11	96.2	2937.35221
25 12 14	24 11 13	87.6	3222.62687				
25 12 14	25 11 15	91.2	3179.04857				
26 12 14	25 11 15	89.8	3224.22291				
26 12 14	26 11 15	92.3	3178.89986				
26 12 15	25 11 14	89.8	3224.22291				
26 12 15	26 11 16	92.3	3178.89986				

14 14 0	13 13 1	70.4	3219.08926	16 15 1	15 14 2	74.4	3229.57650
14 14 0	14 13 1	97.8	3194.71267	16 15 1	16 14 2	96.4	3201.72948
14 14 0	15 15 1	93.7	2947.05778	16 15 2	15 14 1	74.4	3229.57650
14 14 1	13 13 0	70.4	3219.08926	16 15 2	16 16 1	96.4	3201.72948
14 14 1	14 13 2	97.8	3194.71267	17 15 2	16 14 3	76.6	3231.24501
14 14 1	15 15 0	93.7	2947.05778	17 15 2	17 14 3	95.5	3201.65832
15 14 1	14 13 2	73.4	3220.75313	17 15 2	18 16 3	97.0	2933.33147
15 14 1	15 13 2	96.2	3194.63582	17 15 3	16 14 2	76.6	3231.24501
15 14 1	16 15 2	96.0	2945.26302	17 15 3	17 14 2	95.5	3201.65832
15 14 1	14 13 1	73.4	3220.75313	17 15 3	18 16 4	97.0	2933.33147
15 14 1	15 13 2	96.2	3194.63582	18 15 3	17 14 4	79.5	3232.90837
15 14 1	16 15 0	96.0	2945.26302	18 15 3	18 14 4	95.0	3201.58198
16 14 2	15 13 3	76.5	3222.40780	18 15 3	19 16 4	98.0	2931.54512
16 14 2	16 13 3	94.8	3194.54970	18 15 4	17 14 3	79.5	3232.90837
16 14 2	17 15 3	97.0	2943.46089	18 15 4	18 14 3	95.0	3201.58198
16 14 2	15 13 2	76.5	3222.40780	18 15 4	19 16 5	98.0	2931.54512
16 14 2	16 13 3	94.8	3194.54970	19 15 4	18 14 5	82.1	3234.56677
16 14 2	17 15 1	97.0	2943.46089	19 15 4	19 14 5	94.7	3201.50070
17 14 3	16 13 4	79.4	3224.05073	19 15 4	20 16 5	98.4	2929.75666
17 14 3	17 13 4	94.6	3194.45137	19 15 5	18 14 4	82.1	3234.56677
17 14 3	18 15 4	97.5	2941.64959	19 15 5	19 14 4	94.7	3201.50070
17 14 3	16 13 3	79.4	3224.05073	19 15 5	20 16 6	98.4	2929.75666
17 14 3	17 13 4	94.6	3194.45137	20 15 5	19 14 6	84.5	3236.22006
17 14 3	18 15 2	97.5	2941.64959	20 15 5	20 14 6	94.6	3201.41469
18 14 4	17 13 5	82.4	3225.67719	20 15 5	21 16 6	98.4	2927.96495
18 14 4	18 13 5	94.9	3194.33707	20 15 6	19 14 5	84.5	3236.22006
18 14 5	17 13 4	82.4	3225.67719	20 15 6	20 14 5	94.6	3201.41469
18 14 5	18 13 4	94.9	3194.33707	20 15 6	21 16 7	98.4	2927.96495
19 14 5	18 13 6	85.6	3227.27804	21 15 6	20 14 7	86.6	3237.86814
19 14 5	19 13 6	94.8	3194.19713	21 15 6	21 14 7	94.5	3201.32368
19 14 5	20 15 6	99.2	2937.97588	21 15 7	20 14 6	86.6	3237.86814
19 14 6	18 13 5	85.6	3227.27804	21 15 7	21 14 8	94.5	3201.32368
19 14 6	19 13 7	94.8	3194.19713	22 15 7	21 14 8	88.6	3239.51097
19 14 6	20 15 5	99.2	2937.97588	22 15 7	22 14 8	95.3	3201.22698
				22 15 8	21 14 7	88.6	3239.51097
				22 15 8	22 14 9	95.3	3201.22698

Приложение Б

Vibrational-rotational spectroscopy of molecules

Chapter 1

Студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ61	Кузнецов Алексей Валерьевич		

Консультант – лингвист отделения иностранных языков:

Должность	ФИО	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Кабрышева Оксана Павловна		

1. Theoretical background

1.1. Vibrational-rotational spectroscopy of molecules

Vibrational-rotational spectroscopy is one of the most important tools for accurately determining the molecular structure. Vibration-rotation spectroscopy is the study of transitions between the rotational energy levels of two different vibrational energy levels.

The vibrational-rotational transitions S are determined by the sum of the values of the rotational and vibrational terms

$$\begin{aligned}
 S &= F_{v_i}(J) + G(v_i) = \\
 &= B_v J(J+1) - D_v J^2(J+1)^2 + \dots + \omega_e \left(v + \frac{1}{2}\right) + \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 \\
 &+ \dots,
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

where v_i is the vibrational-rotational mode. This equation follows from the Born-Oppenheimer approximation, where we can consider the rotational and vibrational energies of the nuclei separately.

In total, there are three types of rotational-vibrational transitions P , Q and R between the lower and upper states, which are schematically represented in Figure 1.

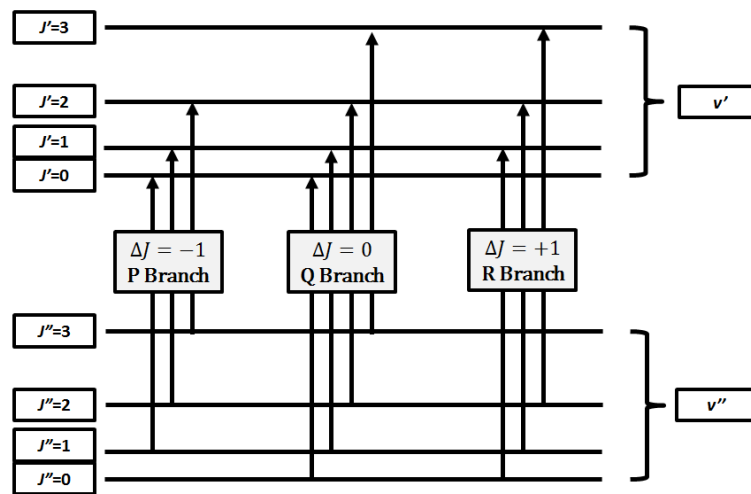


Figure 1 – P , Q , R - branches of vibrational-rotational transitions

The different wave numbers of the energy transitions of the P , Q , and R branches and their intensities form a strip-like structure for the given vibrational mode in the FTIR spectrum.

Vibrational bands for molecules of the asymmetric top type have the classification of A -, B - and C -type (Figure 2). Each type of strip has a clear form, based on the relative intensities of the P -, Q - and R -branches. The selection rules governing the transitions for each type of band are described in more detail in Chapter 1.4.

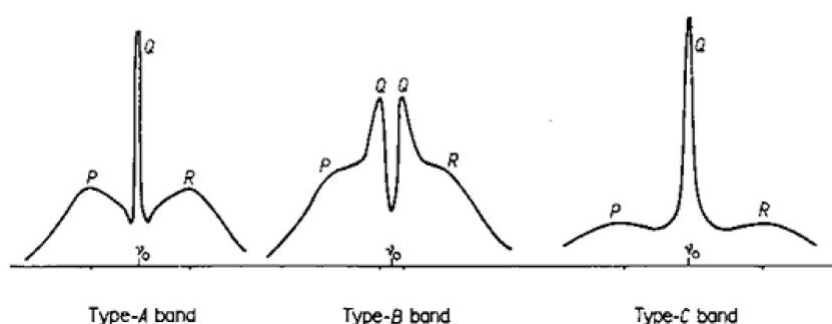


Figure 2 – Classification of bands types [8]

The main problem of rotational-vibrational spectroscopy is the solution of the Schrödinger equation. Knowledge of the solution of this equation makes it possible to fully study the molecule as a quantum object. Therefore, in this chapter we will consider in more detail the singularities of the solution of the equation of the Schrödinger equation.

1.2. Singularities of the solution of the Schrödinger equation for molecules

The solution of the Schrodinger equation is the eigenvalues of the Hamiltonian; these are the possible energies that a quantum system can possess. In addition to the eigenvalues, the solution of this equation is an eigenfunction whose knowledge makes it possible to determine the transition probabilities.

In real life, the Schrodinger equation can be solved only with the Hamiltonian of simple molecular systems, such as the molecular ion H_2^+ , with the Hamiltonian for more complex molecular systems, and there is no solution at all.

Therefore, to solve the equation for more complex molecules, various variants of perturbation theory are used [9, 10].

The main idea of perturbation theory is very simple: we divide the Hamiltonian into two parts

$$H(a) = H_0(a) + h(a), \quad (1.2)$$

where $H_0(a)$ is the Hamilton operator or "unperturbed" operator (we know the solution of the Schrodinger equation with this operator), $h(a)$ is a small addition to the unperturbed operator ("perturbation").

Thus, we can construct a Hamiltonian for any molecules and approximately predict their properties.

In this paper, the vibrational-rotational operator of the Hamiltonian is of interest. Following from perturbation theory, we can also "break it up" into separate terms of different orders of smallness

$$H = H_0 + \sum_{n=1}^{\infty} H_n(\chi^n), \quad (1.3)$$

infinitesimalis defined as χ^n , where χ is a small parameter $\chi \sim (m_e/M_n)^{1/4}$; m_e is the mass of the electron, M_n is the average mass of the nuclei of the molecule.

However, there is a significant difference between the operators (1.2) and (1.3). The fact is that the operators h and H_0 are functions of the same coordinates a .

At the same time, the operators $H_n(\chi^n)$ are functions of the variables on which the initial approximation operator depends, they are also functions of other variables, namely, the vibrational and rotational coordinates. Accordingly, when considering the vibrational-rotational problem, it is convenient to take the vibrational operator as the initial approximation (in this case the perturbation will depend not only on the vibrational but also on the angular variables).

In the classical perturbation theory, the solutions are the sums of various combinations of the matrix elements $\langle \psi | h(a) | \psi' \rangle$, in other words – the numbers.

At the same time, the matrix elements of the vibrational-rotational operator will no longer be numbers, but operators. In the general case, these operators do not commute. Therefore, the use of perturbation theory for molecular problems is incorrect.

Hence, there is a need to develop alternative solutions; one of the solutions is the method of effective operators (Chapter 1.3.)

1.3. The model of effective operators

The essence of the method of effective operators is as follows: suppose we do not have the opportunity to solve the Schrödinger equation with the original Hamiltonian H , then we try to "construct" another Hermitian operator \tilde{H} that has two important properties:

1) the solution of the equation with these operator \tilde{H} is determined in an explicit form;

2) the set \tilde{B} of all solutions of the Schrödinger equation with operator \tilde{H} coincides identically with some subset B of the set A of solutions of the equation with the operator H .

The operator \tilde{H} is called the effective Hamiltonian satisfying these two conditions. One way to build it is based on the use of design operators [11].

Suppose we have the Hamiltonian operator in the following form

$$H = H_0(a) + h(a, b), \quad (1.4)$$

where $H_0(a)$ is the initial approximation, $h(a, b)$ is a perturbation that depends on the variables a, b .

Let E_α and $|\alpha\rangle$ are the eigenvalues and the eigenfunctions of the initial approximation operator, and $|\alpha\rangle$ is a complete orthonormal set of functions that depends on the variables a .

To determine the eigenvalues and eigenfunctions of the operator (1.4), we need to do the following procedure [9, 10, 12]: it is necessary to construct the

matrix of the Hermitian operator H on certain functions $|\alpha i\rangle$, where $|i\rangle$ is an arbitrary set of functions depending on the variables b and satisfying the completeness condition and the orthonormality. Then we diagonalize the resulting matrix by a unitary transformation

$$H \rightarrow H' = A^\dagger H A. \quad (1.5)$$

It is known that the elements of the diagonal matrix H' are the eigenvalues of the original operator H , and the eigenfunctions $|\psi_\beta\rangle$ of the operator will be written by the relation

$$|\psi_\beta(a, b)\rangle = \sum_{\alpha i} A_{\beta, \alpha i} |\alpha i\rangle, \quad (1.6)$$

where $A_{\beta, \alpha i}$ are the elements of the unitary matrix A that diagonalizes the original matrix H . Consequently, choosing a set of a certain set of functions μ , one can solve the problem. However, in molecular spectroscopy, the described technique is impossible to solve practical problems, since the function $|\alpha\rangle$ forms an infinite-dimensional basis. As a result, the diagonalization of the matrix H and H' becomes impossible.

The procedure for constructing and subsequent diagonalization of the matrix H can be performed in two stages:

1. To construct the matrix $\langle \alpha | H | \beta \rangle$ on the functions $|\alpha\rangle$ (here the quantities $\langle \alpha | H | \beta \rangle$ are operators of the variables b);
2. Construct and diagonalize the matrix $\langle i | \langle \alpha | H | \beta \rangle | j \rangle$.

It is obvious that the operator matrix $\langle \alpha | H | \beta \rangle$ will be completely filled (that is, all elements will not be null (Figure 3)). Therefore, if we construct the numerical $\langle i | \langle \alpha | H | \beta \rangle | j \rangle$ for the operator matrix $\langle \alpha | H | \beta \rangle$, then the procedure for determining the eigenvalues and functions reduces to the standard problem [9, 10].

	α'_1	α'_2	...	α'_k	α_1^o	α'_n	α_2^o	α'_m	...
α'_1	x	x		x	0	x	0	x	
α'_2	x	x		x	0	x	0	x	
...		
α'_k	x	x		x	0	x	0	x	
α_1^o	0	0		0	x	0	x	0	
α'_n	x	x		x	0	x	0	x	
α_2^o	0	0		0	x	0	x	0	
α'_m	x	x		x	0	x	0	x	
...		

Figure 3 – The scheme for constructing an effective Hamiltonian

However, there is an alternative option, when instead of the operator H , we can use the operator \tilde{H}

$$\tilde{H} = G^+ H G, \quad (1.7)$$

where G is an arbitrary unitary operator with the condition that $(G - 1)$ is small in comparison with the identity operator. This condition will be satisfied only if the operator G is in the form

$$G = \exp \left(i \sum_{n=1}^{\infty} g_n(\kappa^n) \right), \quad (1.8)$$

where $g_n = g_n(a, b)$ are small Hermitian operators of order (κ^n) .

It is necessary to construct a matrix $\langle \alpha | \tilde{H} | \beta \rangle$ for an effective operator by performing a similar procedure, as for the initial operator H . Since the operator G is arbitrary so far, it can be adopted in such a way that certain elements of the matrix become zero. To this end, we partition the entire space L_α of the wave functions $|\alpha\rangle$ into two subspaces $L_{\alpha 0}$ and $L_{\alpha'}$ such that $L_\alpha = L_{\alpha 0} + L_{\alpha'}$, and $L_{\alpha 0}$ must be finite-dimensional. Then the matrix elements $\langle \alpha | \tilde{H} | \beta \rangle$ can be divided into the following sets of elements

$$\langle \alpha^0 | \tilde{H} | \beta^0 \rangle, \langle \alpha^0 | \tilde{H} | \beta' \rangle, \langle \alpha' | \tilde{H} | \beta^0 \rangle \text{ и } \langle \alpha' | \tilde{H} | \beta' \rangle. \quad (1.9)$$

We choose an operator G such that $\langle \alpha^0 | \tilde{H} | \beta' \rangle$ and $\langle \alpha' | \tilde{H} | \beta^0 \rangle$ become equal to zero. In this case, the matrix $\langle \alpha | \tilde{H} | \beta \rangle$ will be written in the form (Figure 3). If we construct a numerical matrix $\langle i | \langle \alpha | \tilde{H} | \beta \rangle | j \rangle$ then it will have the same form as the matrix $\langle \alpha | \tilde{H} | \beta \rangle$. The eigenvalues of the operator H and \tilde{H} can be determined by diagonalizing the matrix $\langle i | \langle \alpha | H | \beta \rangle | j \rangle$. The diagonalization problem for the matrix A is equivalent to solving the secular equation

$$\det\{A - Ex\} = 0, \quad (1.10)$$

where E is the identity matrix. Since the determinant of the matrix does not change when the rows and columns are rearranged, the matrix (Figure 3) can be reduced to the matrix (Figure 4). It follows that the whole matrix $\langle i | \langle \alpha | \tilde{H} | \beta \rangle | j \rangle$ is divided into two independent submatrices, the further diagonalization of which can be carried out independently. It is important that the submatrix $\langle i | \tilde{H}_{\alpha\phi\phi} | j \rangle$ is finite-dimensional with respect to the indices α and β . If we consider the energy levels generated by only the states $|\alpha_1^0\rangle, |\alpha_2^0\rangle, \dots$ (i.e. states associated with $\tilde{H}_{\alpha\phi\phi}$) (Figure 4), then there is no need to diagonalize the entire matrix $\langle i | \langle \alpha | \tilde{H} | \beta \rangle | j \rangle$. It suffices to consider and diagonalize only its submatrix $\langle i | \tilde{H}_{\alpha\phi\phi} | j \rangle$. The operator $\tilde{H}_{\alpha\phi\phi}$ is an effective operator of N states $|\alpha_1^0\rangle, |\alpha_2^0\rangle, \dots, |\alpha_N^0\rangle$.

$$\begin{bmatrix} & & & 0 & 0 & 0 \\ & \tilde{H}_{\alpha\phi\phi} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ & \vdots & \ddots & \dots & \vdots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & 0 & \dots & x & x & x \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

Figure 4 – Diagram of constructing an effective Hamiltonian

2.4. Selection rules

The selection rules establish the possibility of energy transitions between certain energy levels, accompanied by radiation or energy absorption. This means,

when passing from one state to another, the system either emits or absorbs a quantum of light. The square of the matrix element $\langle \psi_1 | H_{int} | \psi_2 \rangle$ determines the transition probability between the energy states ψ_1 and ψ_2 . Where H_{int} is the operator of interaction of radiation with matter. If $\langle \psi_1 | H_{int} | \psi_2 \rangle = 0$, then the molecule cannot transit from the state ψ_1 to the state ψ_2 . Thanks to the theory of symmetry, one can not compute the matrix elements $\langle \psi_1 | H_{int} | \psi_2 \rangle$ without knowing the ones that are zero. It is necessary to classify the wave functions ψ_1 and ψ_2 of interacting states and the operator H_{int} by symmetry types and use the Wigner-Eckart theorem:

$$\langle \psi_1^{(\Gamma_1)} | H_{int}^{(\Gamma)} | \psi_2^{(\Gamma_2)} \rangle = F_{(\Gamma_2)\sigma_2(\Gamma)\sigma}^{(\Gamma_1)\sigma_1} \langle \psi_1^{(\Gamma_1)} | H_{int}^{(\Gamma)} | \psi_2^{(\Gamma_2)} \rangle. \quad (1.11)$$

It follows that the molecule can transit from the state $\psi_1^{(\Gamma_1)}$ to the state $\psi_2^{(\Gamma_2)}$ [13].

The direct product of symmetry types of the wave functions of the interacting states ψ_1 and ψ_2 ($\Gamma_1 \times \Gamma_2$) contains the symmetry type Γ of the interaction operator, i.e.

$$\Gamma_1 \times \Gamma_2 \supset \Gamma. \quad (1.12)$$

This condition is the essence of selection rules from the point of view of the theory of symmetry [13].

The $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ molecule is an asymmetric top and is isomorphic to the point symmetry group D_{2h} . Molecules of the asymmetric top type have three types of vibrational bands. The selection rules governing the transitions for each type of band are given in Table 2. The A-type, B-type and C-type bands are created when the transient dipole moment is aligned with the *a*-, *b*- and *c*-axis, respectively.

For allowed transitions

1. If $(\nu\Gamma_1^x\nu'\Gamma_2') = A_1$, then the corresponding A-type band ($B_{1u} \rightarrow A_g$);
2. If $(\nu\Gamma_1^x\nu'\Gamma_2') = B_1$, then the corresponding B-type band ($B_{2u} \rightarrow A_g$);
3. If $(\nu\Gamma_1^x\nu'\Gamma_2') = B_2$, then the corresponding C-type band ($B_{3u} \rightarrow A_g$).

Table 2 - Selection rules for *A*-type, *B*-type and *C*-type bands

Band type	ΔJ	ΔK_a	ΔK_c
<i>A</i> -type	$0, \pm 1$	$0, (\pm 2)$	$\pm 1, (\pm 3)$
<i>B</i> -type	$0, \pm 1$	$\pm 1, (\pm 3, \pm 5, \dots)$	$\pm 1, (\pm 3, \pm 5, \dots)$
<i>C</i> -tepe	$0, \pm 1$	$\pm 1, (\pm 3, \pm 5, \dots)$	$0, (\pm 2, \pm 4, \dots)$

Transitions are allowed (using the values in parentheses), but may be too weak to detect